

X

ACTA PHYSICA

ACADEMIAE SCIENTIARUM
HUNGARICAE

ADIUVANTIBUS

Z. GYULAI, L. JÁNOSSY, I. KOVÁCS, K. NOVOBÁTZKY

REDIGIT

P. GOMBÁS

TOMUS I.-3



MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST, 1952-54

ВСТУПЛЕНИЕ

Обновление Венгерской Академии Наук открыло новую главу в истории венгерской науки. Ученые Венгрии всеми силами стремятся служить делу народа и своими исследованиями способствовать созидательному труду построения социализма. Венгерская Народная Республика оказывает развитию научной жизни нашей страны громадную материальную и моральную помощь и наука пользуется в нашей родине таким уважением и такой под держкой, как еще никогда в нашей истории. Одной из характерных черт нашей обновленной науки является связь между научной теорией и практической жизнью. Это взаимодействие оказывает серьезное, плодотворное влияние на развитие нашей науки.

Венгерская Академия Наук поставила себя целью изданием новой серии *Acta Physica* способствовать углублению международных связей прогрессивной науки, дальнейшему развитию науки, делу мира и прогресса и дружбы народов.

176994
N 6683
3R

INTRODUCTION

La renaissance de l'Académie des Sciences de Hongrie ouvre un nouveau chapitre dans l'histoire des sciences hongroises. Les savants hongrois font tous leurs efforts pour servir la cause du peuple travailleur et aider par leurs travaux de recherche le travail créateur de l'édification du socialisme. La République Populaire Hongroise contribue largement, matériellement et moralement, au développement de la vie scientifique de notre pays. Dans notre pays, le travail scientifique jouit d'une estime et d'un soutien tel qu'il n'en a encore jamais joui au cours de notre histoire. Une des caractéristiques de notre vie scientifique renaissante est le contact entre la vie scientifique et la vie pratique de notre pays. Cette influence réciproque se fait fructueusement sentir dans le développement de notre vie scientifique.

Le but de l'Académie des Sciences de Hongrie, en publiant la nouvelle série des *Acta Physica*, est de contribuer par là au développement des relations internationales de la science progressiste, au développement de la science, à la défense de la Paix et du progrès, et au développement de l'amitié entre les peuples.

INTRODUCTION

The rebirth of the Hungarian Academy of Science has opened a new chapter in the history of Hungarian science. The scientists of Hungary endeavour in every way to serve the cause of the working people and with their research work to help in the creative task of building socialism. The Hungarian People's Republic affords vast help and encouragement to the development of the scientific life of our country and scientific work in Hungary today is honoured and aided to an extent that is unparalleled in the history of the land. One of the characteristic features of our reborn science is the connection between scientific theory and the practical life of the country. This inter-relation has a profound stimulative effect on the development of our scientific life.

The aim of the Hungarian Academy of Science in starting the new series of *Acta Physica* is to contribute to the improvement of the international relations of progressive science, to the further development of science, to the cause of peace, progress and the closer friendship of the peoples.

EINLEITUNG

Die Wiedergeburt der Ungarischen Akademie der Wissenschaften eröffnete einen neuen Abschnitt in der Geschichte der ungarischen Wissenschaft. Die ungarischen Gelehrten bemühen sich auf jede Art und Weise, der Sache des werktätigen Volkes zu dienen und mit ihren Forschungen die schöpferische Arbeit des Aufbaues des Sozialismus zu fördern. Zur Entwicklung des wissenschaftlichen Lebens in unserem Lande trägt die ungarische Volksrepublik mit riesiger materieller und moralischer Hilfe bei. Die wissenschaftliche Arbeit in unserer Heimat wird in solchem Masse geschätzt und unterstützt, wie noch niemals in unserer Geschichte. Einer der charakteristischen Züge unserer wiedergeborenen Wissenschaft ist die Verbindung zwischen der wissenschaftlichen Theorie und der Praxis im Leben unseres Landes. Diese Wechselwirkung ist von ernstem, fruchtbarem Einfluss auf die Entwicklung unseres wissenschaftlichen Lebens.

Mit der Ausgabe der neuen Serie der Acta Physica verfolgt die Ungarische Akademie der Wissenschaften das Ziel, beizutragen zur Vertiefung der internationalen Verbindungen der fortschrittlichen Wissenschaften, zur Weiterentwicklung der Wissenschaft, zum Frieden und zum Fortschritt, zur Sache der engeren Freundschaft zwischen den Völkern.

SOME INVESTIGATIONS IN THE FIELD OF THE THEORY OF SOLIDS

I. LINEAR CHAIN OF SIMILAR ATOMS

By

T. A. HOFFMANN and A. KÓNYA

PHYSICAL INSTITUTE OF THE TECHNICAL UNIVERSITY, BUDAPEST

(Received: 23. II. 1950.)

A linear chain built up of similar atoms is treated by the linear combination of atomic orbitals approximation of the molecular orbital method. One can calculate the energy in a simple way for a finite chain as well as for an infinite one. The wave function can also be calculated and conclusions are drawn therefrom for end effects, for instance for work function and dipole layer.

1. Introduction.

The existence of metallic properties and the metallic constitution of solids was an unsolved problem until *Sommerfeld's* theory [1].

Earlier there already existed various theories by means of which it was possible to elucidate some or other of the phenomena connected with metals, but these theories were not able to give even a partially complete picture of the whole group of phenomena connected with solid bodies or metals [2].

Quantum mechanics provided the method by means of which it was possible to represent the phenomena in an entirely new but more adapted form. *Sommerfeld's* theory of conduction [1], later the theories of *Nordheim*, *Bloch* and others, further the *Wigner-Seitz* method and the theories of non-metallic solids provided a valuable and fruitful way of handling the problems [3].

On the other hand, there was quantum chemistry which enabled the problem to be attacked from another side. The quantum chemistry of organic molecules, especially of organic chain molecules showed a smooth way for the treatment of large molecules — not only of organic compounds, but also of inorganic crystals — thus affording a smooth transition to metals, which latter can be treated as if they were giant molecules.

In this paper and the following papers we shall show a possible way of developing some properties of certain solids on the basis of the method used in quantum chemistry. We shall use the molecular-orbital method, because this is more suitable for describing molecules of greater size and greater symmetry. We shall handle the giant molecules in the first approximation in the LCAO approximation (linear combination of atomic orbitals), which corresponds to the high energy approximation of *Bloch's* theory [4].

However, this approximation is more suitable for organic compounds than for metals or alloys; it shows that an almost uniform electron density, corresponding to *Wigner and Seitz's* electron distribution [3] appears even in this case of high energy, i. e. constitutes a bridge from the quantum chemical point of view to that of the modern electronic theory of metals.

Our program will be first to develop the properties of linear atomic chains partly consisting of atoms of one type (pure metals), partly of atoms of different kinds (alloys and impurities) in a following paper. In a forthcoming paper we shall discuss the same problems, extending them to an atomic layer and to a space lattice.

2. The approximate Schrödinger equation for the linear problem.

We shall treat first a linear chain of atoms of finite number, n . This does not mean that we have a one-dimensional problem, in fact, we allow the atoms to fill a three-dimensional space; linearity means here only that the nuclei of the atoms are aligned along a line, so that each atom — except the terminal atoms — has two neighbours. First, we shall assume the atoms to be all equal. We consider now atoms with one valency, i. e. in what follows we shall take into account only one electron per atom. So we can construct the first approximation of the wave-function in the form

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_n \psi_n, \quad (2.1)$$

according to the LCAO approximation of the molecular-orbital method.

Here $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ mean the atomic wave-functions corresponding to the 1st, 2nd, ..., n th atom. In our case they are all equal, except a coordinate translation in the direction of the chain. We shall suppose that they are normalized so that

$$\begin{aligned} \int \psi_i \psi_i^* d\tau &= 1, \\ (i &= 1, 2, \dots, n), \end{aligned} \quad (2.2)$$

(here and in what follows $\int \dots d\tau$ means integration extending over the whole space) but they are not orthogonal to each other, in general not even approximately so.

We shall define the c_i -s in such a way, that the wave function should be normalized too in the sense that

$$\int \psi \psi^* d\tau = 1. \quad (2.3)$$

Our aim is the determination of the coefficients c_i in such a way that ψ should give the best approximation to the problem.

According to quantum chemistry [5] the solution of the problem is equivalent to determining the c_i -s from the linear homogeneous system of equations

$$\begin{aligned} c_1 (H_{11} - S_{11} E) + c_2 (H_{12} - S_{12} E) + \dots + c_n (H_{1n} - S_{1n} E) &= 0, \\ c_1 (H_{21} - S_{21} E) + c_2 (H_{22} - S_{22} E) + \dots + c_n (H_{2n} - S_{2n} E) &= 0, \\ &\vdots \\ c_1 (H_{n1} - S_{n1} E) + c_2 (H_{n2} - S_{n2} E) + \dots + c_n (H_{nn} - S_{nn} E) &= 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

where

$$H_{ik} = H_{ki} = \int \psi_i^* H \psi_k d\tau, \quad (i, k = 1, 2, \dots, n), \quad (2.5)$$

H meaning the one-electron Hamiltonian operator of the system, i. e.

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V(x, y, z), \quad (2.6)$$

where Δ is the Laplace operator, h the Planck constant, m the mass of the electron and $V(x, y, z)$ the potential energy of the electron considered in the field of the nuclei and in the average field of the other electrons, further

$$S_{ii} = 1, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.7)$$

and

$$S_{ik} = S_{ki} = \int \psi_i^* \psi_k d\tau, \quad (i, k = 1, 2, \dots, n) \quad (2.8)$$

and E is the energy parameter of the system.

In our approximation we shall take $V(x, y, z)$ to be added from the potential energy of each of the nuclei and the inner electron shells and we shall neglect the effect of the valency electrons on the potential.

Thus, denoting the atomic potential energy of an electron in the field of the i -th atom by $V_i(x, y, z)$, we have

$$V(x, y, z) = V_1(x, y, z) + V_2(x, y, z) + \dots + V_n(x, y, z). \quad (2.9)$$

Here the $V_i(x, y, z)$ -s are all the same except for a coordinate translation in the direction of the chain.

Neglecting the effect of non-neighbouring atoms, i. e. neglecting all terms of the form

$$\int \psi_i^* V_l(x, y, z) \psi_k d\tau,$$

where $i \neq l$ and $k \neq l$, further neglecting all terms involving non-neighbouring ψ_i and ψ_k , we can write

$$H_{i,i+1} = H_{i+1,i} = H_{12} = \int \psi_2^* H_1 \psi_1 d\tau = \beta, \quad (2.10)$$

$$(i = 1, 2, \dots, n),$$

$$H_{i,i} = H_{1,1} = \int \psi_1^* H_1 \psi_1 d\tau = Q, \quad (2.11)$$

$$(i = 1, 2, \dots, n),$$

$$H_{i,k} = 0, \quad (2.12)$$

$$(i \neq k \pm 1 \text{ and } i \neq k),$$

where

$$H_1 = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + V_1. \quad (2.13)$$

β is called the exchange integral and Q is the ionization energy of a single atom.

Similarly, we shall neglect the overlap of two non-neighbouring atoms, i. e.

$$S_{ik} = 0, \quad (2.14)$$

$$(i \neq k \pm 1 \text{ and } i \neq k),$$

and

$$S_{i,i+1} = S_{i+1,i} = S_{12} = \int \psi_1^* \psi_2 d\tau = S, \quad (2.15)$$

$$(i = 1, 2, \dots, n-1),$$

where S will be called the overlap integral.

So the matrix of the coefficients of equation (2.4) becomes

$$\left\| \begin{array}{ccc} Q-E & \beta-SE & 0 \\ \beta-SE & Q-E & \beta-SE \\ 0 & \beta-SE & Q-E \\ & & \beta-SE & Q-E \\ & & & \beta-SE & Q-E \end{array} \right\|.$$

This is a matrix in which elements other than 0 exist only in the diagonal and in the two bordering »bydiagonals«.

3. Results with $S = 0$.

The whole calculation will be very simple if we neglect the overlap integral, S . This will be justified only in the case $S \ll 1$. This will occur in general only if the atoms are far enough from each other i. e. if the lattice distance is very large.

The system of equations (2.4) has a non-trivial solution for the c_i s only if the determinant of the coefficients i. e. the determinant of the matrix (2.16) is equal to zero. This gives in our case

$$\begin{vmatrix}
 Q-E & \beta & 0 & & \\
 \beta & Q-E & \beta & & \\
 0 & \beta & Q-E & & \\
 & & & \ddots & \\
 & & & & Q-E & \beta \\
 & & & & \beta & Q-E
 \end{vmatrix} = 0 \quad (3.1)$$

where all elements not written down are 0.

There exist a great number of methods for solving this simple determinant equation, but we shall use here a method, which — though seeming too complicated for this simple case, — can be extended to more complicated cases.

To simplify the calculations, we divide (3.1) by β^n (which is not 0) so that we divide each element by β . We introduce further

$$y = \frac{Q-E}{\beta} \quad (3.2)$$

So (3.1) becomes

$$\Delta_n = \begin{vmatrix}
 y & 1 & 0 & & \\
 1 & y & 1 & & \\
 0 & 1 & y & & \\
 & & & \ddots & \\
 & & & & y & 1 \\
 & & & & 1 & y
 \end{vmatrix} = 0, \quad (3.3)$$

n denoting the number of rows and columns.

Now we expand this determinant according to the first row. So we obtain

$$\Delta_n = y \Delta_{n-1} - \Delta_{n-2}. \quad (3.4)$$

This is a recursion formula for Δ_n . The first and second members are

$$\Delta_0 = 1 \quad (3.5)$$

and

$$\Delta_1 = y. \quad (3.6)$$

We shall construct the explicit form for Δ_n in the following way. Let us define the generating function

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_n t^n \quad (3.7)$$

for such t , as to cause the series to converge [6].

Now multiplying $f(t)$ by $t^2 - yt + 1$ term by term and collecting again the terms with equal exponents of t , we have with (3.4), (3.5) and (3.6)

$$(t^2 - yt + 1)f(t) = \Delta_0 + \Delta_1 t - y \Delta_0 t = 1, \quad (3.8)$$

i. e.

$$f(t) = \frac{1}{t^2 - yt + 1}, \quad (3.9)$$

or by developing into partial fractions :

$$f(t) = \frac{\frac{t_2}{t_2 - t_1}}{1 - \frac{t}{t_1}} + \frac{\frac{t_1}{t_1 - t_2}}{1 - \frac{t}{t_2}}, \quad (3.10)$$

where t_1 and t_2 are the roots of

$$t^2 - yt + 1 = 0. \quad (3.11)$$

By developing the expression (3.10) into a power series of t , we have

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t_2}{t_2 - t_1} \frac{1}{t_1^n} + \frac{t_1}{t_1 - t_2} \frac{1}{t_2^n} \right) t^n. \quad (3.12)$$

The comparison of (3.7) with (3.12) gives immediately

$$A_n = \frac{t_2}{t_2 - t_1} \frac{1}{t_1^n} + \frac{t_1}{t_1 - t_2} \frac{1}{t_2^n}, \quad (3.13)$$

or, since

$$t_1 \cdot t_2 = 1, \quad (3.14)$$

$$A_n = \frac{t_2^{n+1} - t_1^{n+1}}{t_2 - t_1}. \quad (3.15)$$

Equation (3.3) is now equivalent to

$$\frac{t_2^{n+1} - t_1^{n+1}}{t_2 - t_1} = 0. \quad (3.16)$$

This equation has n roots, namely

$$\frac{t_2}{t_1} = e^{\frac{2k\pi i}{n+1}}, \quad (3.17)$$

$$(k = 1, 2, \dots, n).$$

(The value with $k = 0$, i. e. $t_2 = t_1$ is no root, because the denominator vanishes and the limit of the left-hand side of (3.16) is

$$(n+1)t_1^n \neq 0 \quad (3.18)$$

for $t_2 \rightarrow t_1$.)

Taking into account (3.14), we can rewrite (3.17) as follows :

$$t_2^2 = e^{\frac{2k\pi i}{n+1}}, \quad (3.19)$$

or

$$t_2 = \pm e^{\frac{k\pi i}{n+1}} \quad (3.20)$$

and so

$$t_1 = \pm e^{-\frac{k\pi i}{n+1}}. \quad (3.21)$$

This solution seems to give $2n$ roots instead of n , but since we can choose t_1 and t_2 freely (i. e. t_1 instead of t_2 and vice versa), noting that

each value of (3.20) corresponds to a value of (3.21) with the opposite sign, we have the n independent solutions :

$$\left. \begin{aligned} t_1 &= e^{\frac{k\pi i}{n+1}}, \\ t_2 &= e^{-\frac{k\pi i}{n+1}}, \\ (k &= 1, 2, \dots, n). \end{aligned} \right\} \quad (3.22)$$

From (3.11) and (3.22) we obtain

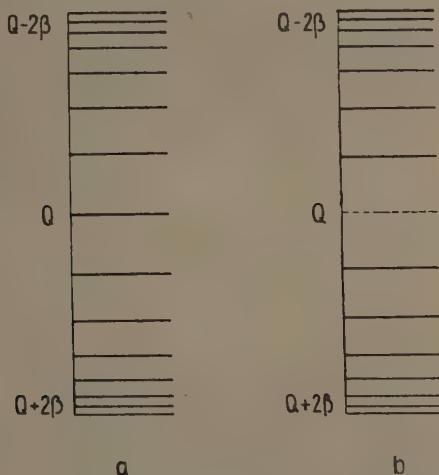


Figure 1. Term scheme for a) n odd, b) n even.

$$y = t_1 + t_2 = e^{\frac{k\pi i}{n+1}} + e^{-\frac{k\pi i}{n+1}} = 2 \cos \frac{k\pi}{n+1} \quad (3.23)$$

By (3.2) this gives for the energy

$$\begin{aligned} E &= Q - 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1}, \\ (k &= 1, 2, \dots, n). \end{aligned} \quad (3.24)$$

This gives a system of n energy terms located on the two sides of $E=Q$. In case n is odd, $E=Q$ is a solution too and the other term-values are located symmetrically to this value. In case n is even, though $E=Q$ is no solution, the solutions are symmetrically placed to $E=Q$. (See fig. 1.)

If $n \rightarrow \infty$, this gives us a band possessing the width 4β . In this case the argument of the cosine in (3.24) can be taken to vary continuously from 0 to π .

Taking

$$x = \frac{k\pi}{n+1} \quad (3.25)$$

we have

$$E = Q - 2\beta \cos x. \quad (3.26)$$

In case n is finite, we can calculate the energy distance between two neighbouring terms :

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2\beta \cos \frac{(k+1)\pi}{n+1} - 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\ &= -4\beta \sin \frac{\pi}{2(n+1)} \sin \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

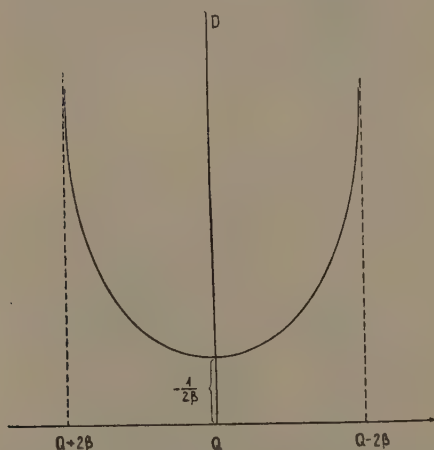


Figure 2. Density of states as a function of E for $S=0$.

If $n \rightarrow \infty$, taking $\sin \frac{\pi}{2(n+1)} \sim \frac{\pi}{2(n+1)}$ and $dx = \frac{\pi}{n+1}$, we can write

$$dE = -2\beta \sin x dx, \quad (3.28)$$

i. e. the density of states :

$$D = \frac{dx}{dE} = \frac{1}{-2\beta \sin x}. \quad (3.29)$$

It is of greater significance to express the density of states as a function of the energy, substituting from (3.26) into (3.29) :

$$D = \frac{1}{2\beta \sqrt{1 - \left(\frac{Q-E}{2\beta}\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{4\beta^2 - (E-Q)^2}} \quad (3.30)$$

(see fig. 2).

Now according to the Pauli principle the electrons will occupy at absolute zero temperature the $\frac{n}{2}$ lowest states doubly. (There is no need here to distinguish between odd or even n values, since n is very large and the conclusions are important only if $n \rightarrow \infty$. So we take n even.)

If — as we shall show later — β is negative, these lowest states correspond to values of $\frac{n}{2} + 1, \frac{n}{2} + 2, \dots, n$ or in the case that $n \rightarrow \infty$ to

$$\frac{\pi}{2} < x < \pi. \quad (3.31)$$

We now can calculate the average energy per electron. We shall do this by averaging (3.26) over the states (3.31). (In this case it is also possible to determine the average value directly by using (3.24).) The average energy per electron will thus be

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} (Q - 2\beta \cos x) dx}{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} dx} = \frac{2}{\pi} \left(Q \frac{\pi}{2} - 2\beta \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \cos x dx \right) = \quad (3.32) \\ &= \frac{2}{\pi} \left(Q \frac{\pi}{2} + 2\beta \right) = Q + \frac{4}{\pi} \beta = Q + 1,273 \beta. \end{aligned}$$

We can draw interesting conclusions also in the case when n is finite. According to (3.24) the average energy per electron will amount in this case, if n is even, to:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{2}{n} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left(Q - 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1} \right) = Q - \frac{4\beta}{n} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\ &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n 2 \sin \frac{\pi}{2(n+1)} \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\ &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left[\sin \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(2k-1)\pi}{2(n+1)} \right] = \\ &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{(2n+1)\pi}{2(n+1)} - 1 \right] = Q - \frac{2\beta}{n} + \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}}, \quad (3.33) \end{aligned}$$

and if n is odd, to:

$$\begin{aligned}
 \bar{E} &= \frac{Q}{n} + \frac{2}{n} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left(Q - 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1} \right) = Q - \frac{4\beta}{n} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\
 &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n 2 \sin \frac{\pi}{2(n+1)} \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\
 &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left[\sin \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(2k-1)\pi}{2(n+1)} \right] = \\
 &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{(2n+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(n+2)\pi}{2(n+1)} \right] = \\
 &= Q - \frac{2\beta}{n \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{\pi}{2(n+1)} - \cos \frac{\pi}{2(n+1)} \right] = \\
 &= Q - \frac{2\beta}{n} + \frac{2\beta}{n} \operatorname{ctg} \frac{\pi}{2(n+1)}. \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

4. Results with $S \neq 0$.

Let us now examine the change if we have a finite overlap integral, S , between neighbouring atoms.

The matrix of coefficients (2.16) gives now the determinant equation for E :

$$\begin{vmatrix}
 Q-E & \beta-SE & 0 & & \\
 \beta-SE & Q-E & \beta-SE & & \\
 0 & \beta-SE & Q-E & & \\
 & & & Q-E & \beta-SE \\
 & & & \beta-SE & Q-E
 \end{vmatrix} = 0 \quad (4.1)$$

instead of (3.1).

We discuss only the case $S < \frac{1}{2}$ which occurs generally in our problems but a similar discussion is also possible in the case $S \geq \frac{1}{2}$. If we exclude now

the value $E = \frac{\beta}{S}$, after dividing (4.1) by $(\beta - SE)^n$ and taking

$$y = \frac{Q - E}{\beta - SE} \quad (4.2)$$

we obtain equation (3.3) again.

(3.23) gives now with (4.2)

$$\frac{Q - E}{\beta - SE} = 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1} \quad (4.3)$$

$(k = 1, 2, \dots, n),$

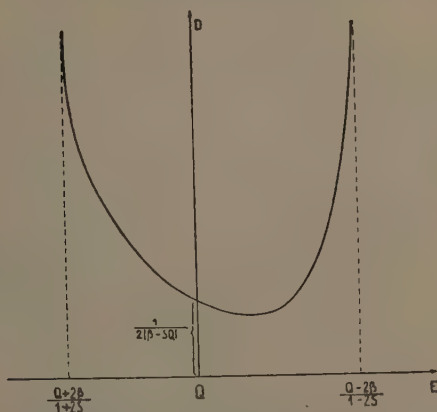


Figure 3. Density of states as a function of E for $S \neq 0$.

or solved for E :

$$E = \frac{Q - 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1}}{1 - 2S \cos \frac{k\pi}{n+1}}, \quad (4.4)$$

$(k = 1, 2, \dots, n).$

Introducing (3.25), this gives for $n \rightarrow \infty$

$$E = \frac{Q - 2\beta \cos x}{1 - 2S \cos x}, \quad (4.5)$$

The energy distance between two neighbouring terms is accordingly,

$$\text{with } dx = \frac{\pi}{n+1}$$

$$dE = \frac{2|\beta - QS| \sin x dx}{(1 - 2S \cos x)^2}, \quad (4.6)$$

i. e. the density of states

$$D = \frac{dx}{dE} = \frac{(1 - 2S \cos x)^2}{2|\beta - QS| \sin x}, \quad (4.7)$$

or expressed by the energy itself:

$$D = \frac{|\beta - SQ|}{|\beta - SE| \sqrt{4(\beta - SE)^2 - (E - Q)^2}} \quad (4.8)$$

(See fig. 3.).

The lowest $\frac{\pi}{2}$ values for $n \rightarrow \infty$ are given again by (3.31) and so the average energy per electron is:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{Q - 2\beta \cos x}{1 - 2S \cos x} dx}{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} dx} = \frac{2}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{Q - 2\beta \cos x}{1 - 2S \cos x} dx = \\ &= \frac{2}{\pi} \left[\frac{\beta}{S} x \right]_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} + \frac{2}{\pi} \left(Q - \frac{\beta}{S} \right) \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{dx}{1 - 2S \cos x} = \\ &= \frac{\beta}{S} + \frac{4 \left(Q - \frac{\beta}{S} \right)}{\pi \sqrt{1 - 4S^2}} \left[\arctg \left(\left| \frac{1 + 2S}{1 - 2S} \right| \operatorname{tg} \frac{x}{2} \right) \right]_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} = \\ &= \frac{\beta}{S} + \frac{4 \left(Q - \frac{\beta}{S} \right)}{\pi \sqrt{1 - 4S^2}} \left(\frac{\pi}{2} - \arctg \sqrt{\frac{1 + 2S}{1 - 2S}} \right) = \\ &= \frac{\beta}{S} + \frac{2 \left(Q - \frac{\beta}{S} \right)}{\pi \sqrt{1 - 4S^2}} \arccos 2S. \end{aligned} \quad (4.9)$$

5. The wave functions.

Now, being in possession of the characteristic values of E , we can solve the system of equations (2.4) and so construct the wave functions in the zeroth approximation. Taking into account (2.16), we can rewrite the system of equations (2.4):

$$\left. \begin{aligned} c_1(Q-E) + c_2(\beta-SE) &= 0, \\ c_{m-1}(\beta-SE) + c_m(Q-E) + c_{m+1}(\beta-SE) &= 0, \\ (m=2, 3, \dots, n-1), \\ c_{n-1}(\beta-SE) + c_n(Q-E) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.1)$$

Dividing each equation by $\beta-SE$ and using the notation (4.2), we have

$$\left. \begin{aligned} c_1 y + c_2 &= 0, \\ c_{m-1} + c_m y + c_{m+1} &= 0, \\ (m=2, 3, \dots, n-1), \\ c_{n-1} + c_n y &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (5.2)$$

where in the value of y we must take one of the characteristic values of E . say that corresponding to the value k in equation (4.4). The coefficients of this term value, E_k , shall be denoted $c_m^{(k)}$, the corresponding y shall be written y_k . Then the c -s are determined, if we take the normalization also into account. The calculations are as follows.

In (5.2) we can omit one of the equations, say the last one and we can take one of the c -s arbitrarily for the moment, say c_1 .

Thus we retain equation (3.4) again with c_{m+1} instead of J_n and $-y$ instead of y and with the initial values

$$c_1^{(k)} = c_1^{(k)} \quad (\text{arbitrary}) \quad (5.3)$$

and

$$c_2^{(k)} = -y_k c_1^{(k)}, \quad (5.4)$$

where from (4.3) we take

$$y_k = 2 \cos \frac{k\pi}{n+1} \quad (5.5)$$

The solution (3.15) gives thus

$$c_m^{(k)} = \frac{t_2^m - t_1^m}{t_2 - t_1} c_1^{(k)}, \quad (5.6)$$

where t_1 and t_2 are the solutions of the equation

$$t^2 + y_k t + 1 = 0, \quad (5.7)$$

i. e.

$$t_{1,2} = -e^{\pm \frac{ik\pi}{n+1}}. \quad (5.8)$$

With these values (5.6) becomes

$$c_m^{(k)} = (-1)^{m+1} \frac{\sin \frac{mk\pi}{n+1}}{\frac{k\pi}{\sin \frac{k\pi}{n+1}}} c_1^{(k)}. \quad (5.9)$$

The normalization requires

$$\sum_{m=1}^n |c_m^{(k)}|^2 + 2S \sum_{m=1}^{n-1} c_m^{(k)} c_{m+1}^{(k)} = 1. \quad (5.10)$$

The value of $c_1^{(k)}$ can be found thus up to a factor of modulus 1:

$$c_1^{(k)} = \frac{\sin \frac{k\pi}{n+1}}{\left[\sum_{m=1}^n \sin^2 \frac{mk\pi}{n+1} - 2S \sum_{m=1}^{n-1} \sin \frac{mk\pi}{n+1} \sin \frac{(m+1)k\pi}{n+1} \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (5.11)$$

and so from (5.9) and (5.11)

$$c_m^{(k)} = \frac{(-1)^{m+1} \sin \frac{mk\pi}{n+1}}{\left[\sum_{p=1}^n \sin^2 \frac{pk\pi}{n+1} - 2S \sum_{p=1}^{n-1} \sin \frac{pk\pi}{n+1} \sin \frac{(p+1)k\pi}{n+1} \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (5.12)$$

We can easily sum up the finite series in the denominator:

$$\begin{aligned} \sum_{p=1}^n \sin^2 \frac{pk\pi}{n+1} &= \frac{1}{2} \sum_{p=1}^n \left(1 - \cos \frac{2pk\pi}{n+1} \right) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{p=1}^n \cos \frac{2pk\pi}{n+1} = \\ &= \frac{n}{2} - \frac{1}{4 \sin \frac{k\pi}{n+1}} \sum_{p=1}^n 2 \sin \frac{k\pi}{n+1} \cos \frac{2pk\pi}{n+1} = \\ &= \frac{n}{2} - \frac{1}{4 \sin \frac{k\pi}{n+1}} \sum_{p=1}^n \left[\sin \frac{(2p+1)k\pi}{n+1} - \sin \frac{(2p-1)k\pi}{n+1} \right] = \\ &= \frac{n}{2} - \frac{1}{4 \sin \frac{k\pi}{n+1}} \left[\sin \frac{(2n+1)k\pi}{n+1} - \sin \frac{k\pi}{n+1} \right] = \\ &= \frac{2n+1}{4} - \frac{1}{4} \frac{\sin \frac{(2n+1)k\pi}{n+1}}{\sin \frac{k\pi}{n+1}} = \frac{2n+1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{n+1}{2}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

further

$$\begin{aligned}
 -2 \sum_{p=1}^{n-1} \sin \frac{pk\pi}{n+1} \sin \frac{(p+1)k\pi}{n+1} &= \sum_{p=1}^{n-1} \left[\cos \frac{(2p+1)k\pi}{n+1} - \cos \frac{k\pi}{n+1} \right] = \\
 &= -(n-1) \cos \frac{k\pi}{n+1} + \sum_{p=1}^{n-1} \cos \frac{(2p+1)k\pi}{n+1} = \\
 &= -(n-1) \cos \frac{k\pi}{n+1} + \frac{1}{2 \sin \frac{k\pi}{n+1}} \sum_{p=1}^{n-1} 2 \sin \frac{k\pi}{n+1} \cos \frac{(2p+1)k\pi}{n+1} = \\
 &= -(n-1) \cos \frac{k\pi}{n+1} + \frac{1}{2 \sin \frac{k\pi}{n+1}} \sum_{p=1}^{n-1} \left[\sin \frac{(2p+1)k\pi}{n+1} - \sin \frac{2pk\pi}{n+1} \right] = \\
 &= -(n-1) \cos \frac{k\pi}{n+1} + \frac{1}{2 \sin \frac{k\pi}{n+1}} \left[\sin \frac{2nk\pi}{n+1} - \sin \frac{2k\pi}{n+1} \right] = \\
 &= -(n-1) \cos \frac{k\pi}{n+1} - \frac{\sin \frac{2k\pi}{n+1}}{\sin \frac{k\pi}{n+1}} = \\
 &= -(n-1) \cos \frac{k\pi}{n+1} - 2 \cos \frac{k\pi}{n+1} = -(n+1) \cos \frac{k\pi}{n+1}. \quad (5.14)
 \end{aligned}$$

So (5.12) is simply

$$\begin{aligned}
 c_m^{(k)} &= \frac{(-1)^{m+1} \sin \frac{mk\pi}{n+1}}{\left[\frac{n+1}{2} - (n+1)S \cos \frac{k\pi}{n+1} \right]^{\frac{1}{2}}} = \\
 &= \frac{(-1)^{m+1} \sqrt{2} \sin \frac{mk\pi}{n+1}}{\sqrt{n+1} \sqrt{1 - 2S \cos \frac{mk\pi}{n+1}}}, \quad (5.15)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (k &= 1, 2, \dots, n), \\
 (m &= 1, 2, \dots, n).
 \end{aligned}$$

For the case $S=0$ this reduces to

$$c_m^{(k)} = (-1)^{m+1} \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin \frac{mk\pi}{n+1}, \quad (5.16)$$

$$(k = 1, 2, \dots, n),$$

$$(m = 1, 2, \dots, n).$$

Introducing (3.25), we can rewrite (5.15) and (5.16), respectively, if $n \rightarrow \infty$

$$c_m(x) = (-1)^{m+1} \sqrt{\frac{2}{n+1}} \frac{\sin mx}{\sqrt{1-2S \cos x}} \quad (5.17)$$

and

$$c_m(x) = (-1)^{m+1} \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin mx. \quad (5.18)$$

Now let us consider the electron density throughout the whole molecule. According to (2.1), this is for a *single* state,

$$\begin{aligned} \varrho_k &= \psi^{(k)} \psi^{(k)*} = \sum_{m=1}^n c_m^{(k)} \psi_m \sum_{m=1}^n c_m^{(k)*} \psi_m^* = \\ &= \sum_{m=1}^n |c_m^{(k)}|^2 |\psi_m|^2 + \sum_{m \neq l} c_m^{(k)} c_l^{(k)*} \psi_m \psi_l^*, \end{aligned} \quad (5.19)$$

where $\psi^{(k)}$ denotes the wave function (2.1) with coefficients $c_m^{(k)}$. The ψ_m -s are now functions of the space coordinates. In our approximation we can neglect all the products of the ψ -s belonging to non-neighbouring nuclei. So the second sum in (5.19) may be written:

$$\sum_{m=1}^n c_m^{(k)} c_l^{(k)*} \psi_m \psi_l^* = 2\mathcal{R} \sum_{m=1}^{n-1} c_m^{(k)} c_{m+1}^{(k)*} \psi_m \psi_{m+1}^*, \quad (5.20)$$

where \mathcal{R} means the real part of the sum.

Now the total electron density can be obtained if we sum up the electron densities for single states for the states which are occupied.

In case n is even, this gives

$$\begin{aligned} \varrho &= 2 \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \varrho_k = \\ &= \sum_{m=1}^n D_m |\psi_m|^2 + \sum_{m=1}^{n-1} d_m \mathcal{R}(\psi_m \psi_{m+1}^*), \end{aligned} \quad (5.21)$$

since the $c_m^{(k)}$ are all complex numbers of the same argument, where

$$D_m = 2 \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n |c_m^{(k)}|^2, \quad (5.22)$$

$$(m = 1, 2, \dots, n)$$

and

$$d_m = 4 \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n c_m^{(k)} c_{m+1}^{(k)*}, \quad (5.23)$$

$$(m = 1, 2, \dots, n-1).$$

Similarly, in case n is odd, we have:

$$\varrho = \varrho_{\frac{n+1}{2}} + 2 \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \varrho_k = \sum_{m=1}^n D_m |\psi_m|^2 + \sum_{m=1}^{n-1} d_m \mathcal{R}(\psi_m \psi_{m+1}), \quad (5.24)$$

where now

$$D_m = |c_m^{(\frac{n+1}{2})}|^2 + 2 \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n |c_m^{(k)}|^2, \quad (5.25)$$

$$(m = 1, 2, \dots, n),$$

and

$$d_m = 2 c_m^{(\frac{n+1}{2})} c_{m+1}^{(\frac{n+1}{2})*} + 4 \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n c_m^{(k)} c_{m+1}^{(k)*}, \quad (5.26)$$

$$(m = 1, 2, \dots, n-1).$$

For n finite, only in the case $S = 0$ can the D and d coefficients be evaluated in a simple way.

In this case, with (5.16), (5.22), (5.23), (5.25) and (5.26) we have for n even

$$\begin{aligned} D_m &= \frac{4}{n+1} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \sin^2 \frac{mk\pi}{n+1} = \\ &= \frac{2}{n+1} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left(1 - \cos \frac{2mk\pi}{n+1} \right) = \\ &= \frac{n}{n+1} - \frac{2}{n+1} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \cos \frac{2mk\pi}{n+1} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{n}{n+1} - \frac{1}{(n+1) \sin \frac{m\pi}{n+1}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n 2 \sin \frac{m\pi}{n+1} \cos \frac{2mk\pi}{n+1} = \\
&= \frac{n}{n+1} - \frac{1}{(n+1) \sin \frac{m\pi}{n+1}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left[\sin \frac{(2k+1)m\pi}{n+1} - \sin \frac{(2k-1)m\pi}{n+1} \right] = \\
&= \frac{n}{n+1} - \frac{1}{(n+1) \sin \frac{m\pi}{n+1}} \left[\sin \frac{(2n+1)m\pi}{n+1} - \sin m\pi \right] = \\
&= \frac{n}{n+1} - \frac{1}{n+1} \frac{\sin \frac{(2n+1)m\pi}{n+1}}{\sin \frac{m\pi}{n+1}} = \frac{n}{n+1} + \frac{1}{n+1} = 1, \quad (5.27)
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
d_m &= -\frac{8}{n+1} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \sin \frac{mk\pi}{n+1} \sin \frac{(m+1)k\pi}{n+1} = \\
&= \frac{4}{n+1} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left[\cos \frac{(2m+1)k\pi}{n+1} - \cos \frac{k\pi}{n+1} \right] = \\
&= \frac{2}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n 2 \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)} \cos \frac{(2m+1)k\pi}{n+1} - \\
&\quad - \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n 2 \sin \frac{\pi}{2(n+1)} \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\
&= \frac{2}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left[\sin \frac{(2k+1)(2m+1)\pi}{2(n+1)} - \right. \\
&\quad \left. - \sin \frac{(2k-1)(2m+1)\pi}{2(n+1)} \right] - \\
&\quad - \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^n \left[\sin \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(2k-1)\pi}{2(n+1)} \right] =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{(2n+1)(2m+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(2m+1)\pi}{2} \right] - \\
 &\quad - \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{(2n+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{\pi}{2} \right] = \\
 &= \frac{2}{n+1} + \frac{2(-1)^{m+1}}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} - \frac{2}{n+1} + \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} = \\
 &= \frac{2}{n+1} \left[\frac{1}{\sin \frac{\pi}{2(n+1)}} + \frac{(-1)^{m+1}}{\sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \right] \quad (5.28)
 \end{aligned}$$

and for n odd

$$\begin{aligned}
 D_m &= \frac{2}{n+1} \sin^2 \frac{m\pi}{2} + \frac{4}{n+1} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \sin^2 \frac{mk\pi}{n+1} = \\
 &= \frac{2}{n+1} \sin^2 \frac{m\pi}{2} + \frac{2}{n+1} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left(1 - \cos \frac{2mk\pi}{n+1} \right) = \\
 &= \frac{2}{n+1} \sin^2 \frac{m\pi}{2} + \frac{n-1}{n+1} - \frac{1}{(n+1) \sin \frac{m\pi}{n+1}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n 2 \sin \frac{m\pi}{n+1} \cos \frac{2mk\pi}{n+1} = \\
 &= \frac{2}{n+1} \sin^2 \frac{m\pi}{2} + \frac{n-1}{n+1} - \frac{1}{(n+1) \sin \frac{m\pi}{n+1}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left[\sin \frac{(2k+1)m\pi}{n+1} \right. \\
 &\quad \left. - \sin \frac{(2k-1)m\pi}{n+1} \right] = \frac{2}{n+1} \sin^2 \frac{m\pi}{2} + \frac{n-1}{n+1} - \\
 &\quad - \frac{1}{(n+1) \sin \frac{m\pi}{n+1}} \left[\sin \frac{(2n+1)m\pi}{n+1} - \sin \frac{(n+2)m\pi}{n+1} \right] = \\
 &= \frac{2}{n+1} \sin^2 \frac{m\pi}{2} + \frac{n-1}{n+1} + \frac{1}{n+1} + \frac{1}{n+1} \cos m\pi = 1 \quad (5.29)
 \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
d_m &= -\frac{4}{n+1} \sin \frac{m\pi}{2} \sin \frac{(m+1)\pi}{2} - \frac{8}{n+1} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \sin \frac{mk\pi}{n+1} \sin \frac{(m+1)k\pi}{n+1} = \\
&= \frac{4}{n+1} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left[\cos \frac{(2m+1)k\pi}{n+1} - \cos \frac{k\pi}{n+1} \right] = \\
&= \frac{2}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n 2 \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)} \cos \frac{(2m+1)k\pi}{n+1} - \\
&\quad - \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n 2 \sin \frac{\pi}{2(n+1)} \cos \frac{k\pi}{n+1} = \\
&= \frac{2}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left[\sin \frac{(2k+1)(2m+1)\pi}{2(n+1)} - \right. \\
&\quad \left. - \sin \frac{(2k-1)(2m+1)\pi}{2(n+1)} \right] - \\
&\quad - \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \sum_{k=\frac{n+3}{2}}^n \left[\sin \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(2k-1)\pi}{2(n+1)} \right] = \\
&= \frac{2}{(n+1) \sin \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{(2n+1)(2m+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(n+2)(2m+1)\pi}{2(n+1)} \right] - \\
&\quad - \frac{2}{(n+1) \sin \frac{\pi}{2(n+1)}} \left[\sin \frac{(2n+1)\pi}{2(n+1)} - \sin \frac{(n+2)\pi}{2(n+1)} \right] = \\
&= \frac{2}{n+1} + (-1)^{m+1} \frac{2}{n+1} \operatorname{ctg} \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)} - \frac{2}{n+1} + \frac{2}{n+1} \operatorname{ctg} \frac{\pi}{2(n+1)} = \\
&= \frac{2}{n+1} \left[\operatorname{ctg} \frac{\pi}{2(n+1)} + (-1)^{m+1} \operatorname{ctg} \frac{(2m+1)\pi}{2(n+1)} \right]. \quad (5.30)
\end{aligned}$$

The other case, in which we can draw conclusions, is the case $S \neq 0$,
 $\rightarrow \infty$. In this case we have, using (3.25), (5.17), (5.22) and (5.23):

$$D_m = \frac{4}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{\sin^2 mx}{1-2S \cos x} dx \quad (5.31)$$

and

$$d_m = - \frac{8}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{\sin mx \sin (m+1)x}{1-2S \cos x} dx. \quad (5.32)$$

The integrals in (5.31) and (5.32) can be calculated by a method similar to that used in Section 3.

We can write for (5.31)

$$D_m = \frac{2}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{1 - \cos 2mx}{1-2S \cos x} dx = E_0 - E_{2m}, \quad (5.33)$$

where

$$E_i = \frac{2}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{\cos ix}{1-2S \cos x} dx. \quad (5.34)$$

Similarly, we can rewrite (5.32) as follows:

$$d_m = \frac{4}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{\cos (2m+1)x - \cos x}{1-2S \cos x} dx = 2E_{2m+1} - 2E_1. \quad (5.35)$$

Now the E_i -s have a simple recurrence formula, viz.:

$$\begin{aligned} E_i &= \frac{2}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{\cos (i-1)x \cos x}{1-2S \cos x} dx - \frac{2}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{\sin (i-1)x \sin x}{1-2S \cos x} dx = \\ &= - \frac{1}{\pi S} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \cos (i-1)x dx + \frac{1}{2S} E_{i-1} + \frac{1}{2} E_i - \frac{1}{2} E_{i-2} = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\pi S} \frac{\sin(i-1)\frac{\pi}{2}}{i-1} + \frac{1}{2S} E_{i-1} + \frac{1}{2} E_i - \frac{1}{2} E_{i-2}, \quad (5.36)$$

$$E_i - \frac{1}{S} E_{i-1} + E_{i-2} = \frac{2}{\pi S} \frac{\sin(i-1)\frac{\pi}{2}}{i-1}. \quad (5.37)$$

The explicit form of the E_i -s can be given by the method of the generating function. We shall define

$$f(t) = \sum_{i=0}^{\infty} E_i t^i. \quad (5.38)$$

Now, with (5.37), we have

$$\left(1 - \frac{t}{S} + t^2\right) f(t) = E_0 + \left(E_1 - \frac{E_0}{S}\right) t + \frac{2}{\pi S} \sum_{i=2}^{\infty} \frac{\sin(i-1)\frac{\pi}{2}}{i-1} t^i. \quad (5.39)$$

The sum on the right-hand side of (5.39) has only members with even i , since for i odd $\sin(i-1)\frac{\pi}{2}$ vanishes. Thus we can write

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi S} \sum_{i=2}^{\infty} \frac{\sin(i-1)\frac{\pi}{2}}{i-1} t^i &= \frac{2}{\pi S} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin(2i-1)\frac{\pi}{2}}{2i-1} t^{2i} = \\ &= \frac{2}{\pi S} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i+1}}{2i-1} t^{2i} = \frac{2}{\pi S} t \operatorname{arc} \operatorname{tg} t. \end{aligned} \quad (5.40)$$

From (5.39) and (5.40) follows :

$$f(t) = \frac{E_0 + \left(E_1 - \frac{E_0}{S}\right) t + \frac{2t}{\pi S} \operatorname{arc} \operatorname{tg} t}{1 - \frac{t}{S} + t^2}. \quad (5.41)$$

We develop (5.41) into partial fractions (in a generalized sense) :

$$f(t) = \frac{E_0 \left(t_2 - \frac{1}{S}\right) + E_1}{1 - \frac{t}{t_1}} + \frac{E_0 \left(t_1 - \frac{1}{S}\right) + E_1}{1 - \frac{t}{t_2}} +$$

$$+ \frac{2}{\pi S(t_2 - t_1)} \left(\frac{1}{1 - \frac{t}{t_1}} - \frac{1}{1 - \frac{t}{t_2}} \right) \operatorname{arc} \operatorname{tg} t, \quad (5.42)$$

where t_1 and t_2 are roots of the equation

$$t^2 - \frac{1}{S} + 1 = 0. \quad (5.43)$$

We now develop (5.42) in powers of t as follows:

$$\begin{aligned} f(t) = & \frac{E_0 \left(t_2 - \frac{1}{S} \right) + E_1}{t_2 - t_1} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^i}{t_1^i} + \frac{E_0 \left(t_1 - \frac{1}{S} \right) + E_1}{t_1 - t_1} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^i}{t_2^i} + \\ & + \frac{2}{\pi S(t_2 - t_1)} \left[\sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{1}{t_1^j} - \frac{1}{t_2^j} \right) t^j \right] \left[\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l t^{2l+1}}{2l+1} \right]. \end{aligned} \quad (5.44)$$

We must now multiply the two series in the third term of the right-hand side of (5.44). Our result is, for sufficiently small t :

$$\left[\sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{1}{t_1^j} - \frac{1}{t_2^j} \right) t^j \right] \left[\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l t^{2l+1}}{2l+1} \right] = \sum_{i=0}^{\infty} g_i t^i, \quad (5.45)$$

where

$$g_i = \sum_{l=0}^{\left[\frac{i-1}{2} \right]} \frac{(-1)^l}{2l+1} \left(\frac{1}{t_1^{i-2l-1}} - \frac{1}{t_2^{i-2l-1}} \right) \quad (5.46)$$

(and $g_0 = 0$).

Thus we obtain from (5.44) and (5.38):

$$E_i = \frac{E_0 \left(t_2 - \frac{1}{S} \right) + E_1}{(t_2 - t_1) t_1^i} + \frac{E_0 \left(t_1 - \frac{1}{S} \right) + E_1}{(t_1 - t_2) t_2^i} + \frac{2}{\pi S(t_2 - t_1)} g_i. \quad (5.47)$$

Using (5.43), we can therefore write

$$\begin{aligned} E_i = & \frac{4S}{\pi(1-4S^2)} \operatorname{arc} \cos 2S \operatorname{sh} \left[(i+1) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] - \\ & - \left[\frac{2}{\pi(1-4S^2)} \operatorname{arc} \cos 2S + \frac{1}{\sqrt{1-4S^2}} \right] \operatorname{sh} \left[i \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] + \\ & + \frac{4}{\pi \sqrt{1-4S^2}} \sum_{l=0}^{\left[\frac{i-1}{2} \right]} \frac{(-1)^l}{2l+1} \operatorname{sh} \left[(i-2l-1) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right], \end{aligned} \quad (5.48)$$

taking into account that

$$E_0 = \frac{2}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\pi} \frac{dx}{1-2S \cos x} = \frac{2}{\pi \sqrt{1-4S^2}} \arccos 2S \quad (5.49)$$

and

$$E_1 = \frac{E_0 - 1}{2S} \quad (5.50)$$

Now from (5.33), (5.35), and (5.48) we find

$$\begin{aligned} D_m = & \frac{2}{\pi \sqrt{1-4S^2}} \arccos 2S - \frac{4S}{\pi(1-4S^2)} \arccos 2S \operatorname{sh} \left[(2m+1) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] + \\ & + \left[\frac{2}{\pi(1-4S^2)} \arccos 2S + \frac{1}{\sqrt{1-4S^2}} \right] \operatorname{sh} \left[2m \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] - \\ & - \frac{4}{\pi \sqrt{1-4S^2}} \sum_{l=0}^{m-1} \frac{(-1)^l}{2l+1} \operatorname{sh} \left[(2m-2l-1) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] \quad (5.51) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} d_m = & \frac{1}{S} - \frac{2}{\pi S \sqrt{1-4S^2}} \arccos 2S + \\ & + \frac{8S}{\pi(1-4S^2)} \arccos 2S \operatorname{sh} \left[(2m+2) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] - \\ & - \left[\frac{4}{\pi(1-4S^2)} \arccos 2S + \frac{2}{\sqrt{1-4S^2}} \right] \operatorname{sh} \left[(2m+1) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right] + \\ & + \frac{8}{\pi \sqrt{1-4S^2}} \sum_{l=0}^{m-1} \frac{(-1)^l}{2l+1} \operatorname{sh} \left[(2m-2l) \operatorname{arch} \frac{1}{2S} \right]. \quad (5.52) \end{aligned}$$

It is possible to deduct the behaviour of D and d for $m \rightarrow \infty$ (i. e. the inner part of the chain) from (5.51) and (5.52), but it is simpler if we use (5.37), (5.33) and (5.35). From (5.34) we conclude for $i \rightarrow \infty$

$$E_i \rightarrow 0 \quad (5.53)$$

and so

$$D_{\infty} = \frac{2}{\pi \sqrt{1-4S^2}} \arccos 2S \quad (5.54)$$

and

$$d_{\infty} = \frac{1}{S} - \frac{2}{\pi S \sqrt{1-4S^2}} \arccos 2S. \quad (5.55)$$

If we now wish to calculate the distribution of the electrons to the ions, we must integrate (5.21) or (5.24) over the space in the vicinity of the m -th ion. Now the integral of $|\psi_m|^2$ can be extended from the space in the vicinity of the m -th ion to the whole space, because the integrand decreases exponentially with the distance. But the integral extended over the whole space gives 1 because of the normalization.

Similarly the integral of $\mathcal{R}(\psi_m \psi_{m+1}^*)$ can be extended over the whole space, but in this case we have to take into account only one half of this integral, the other half belonging to the neighbouring ion. This gives $\frac{1}{2} S$. The other members are negligible because of the exponential decrease of the wave functions.

So we obtain for the number of electrons in the vicinity of the m -th ion, with (5.33), (5.35), (5.37), (5.49) and (5.50)

$$\begin{aligned} N_m &= \int_m \varrho d\tau = D_m + \frac{1}{2} S d_{m-1} + \frac{1}{2} S d_m = E_0 - E_{2m} + S E_{2m-1} + \\ &+ S E_{2m+1} - 2 S E_1 = E_0 - 2 S E_1 + S \left(E_{2m+1} - \frac{1}{S} E_{2m} + E_{2m-1} \right) = \\ &= E_0 - 2 S E_1 = 1. \end{aligned} \quad (5.56)$$

This means that the electrons are distributed uniformly in the chain.

6. End effects.

(5.56) denotes by no means that there is no departure from the uniform charge distribution even in an ideal crystal. It only gives the total electronic charge surrounding an ion, but the charge density in the neighbourhood is not uniform at all. So, for instance, we could calculate the dipole moment along the chain. Naturally — by symmetry — the dipole moment through the whole chain is 0, but we are interested here only in the surface dipole moment, i. e. the dipole moment which arises if we take into account the charges from inside the chain to one of its ends.

This means that we have to calculate the dipole moment of half an infinite chain only.

Now this dipole moment is not of an infinitesimal length; we can, however, calculate the energy needed to transmit a charged particle through it if we do not take a simple chain, but a three-dimensional crystal. In this case, naturally, we neglect that we take the whole effect as superposed from that of the chain without taking into account the altered situation by taking the space lattice instead of the linear one.

Let us consider the case, treated in classical electrodynamics, of a dipole layer. We suppose that the dipole moment of the unit area of the layer be μ . So if we transverse the dipole layer we get a potential drop:

$$V_2 - V_1 = 4\pi\mu. \quad (6.1)$$

We have now to calculate the dipole moment per unit area of the surface, μ . If we denote the dipole moment of a single chain by M , further the lattice distance in the chain by δ , considering a simple cubic crystal, we have

$$\mu = \frac{M}{\delta^2}. \quad (6.2)$$

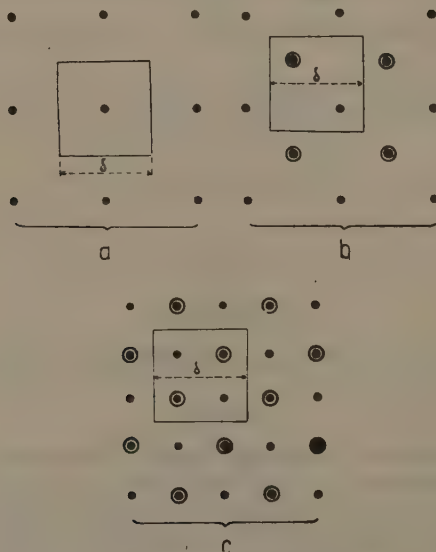


Figure 4.

⊙ Atoms $\frac{\delta}{2}$ below the surface.

• Atoms on the surface.

a) Simple cubic lattice, b) body-centered cubic lattice,
c) face-centered cubic lattice.

In a body-centered cubic crystal this modifies to

$$\mu = \frac{2M}{\delta^2}. \quad (6.3)$$

and in a face-centered cubic crystal to

$$\mu = \frac{4M}{\delta^2}, \quad (6.4)$$

as one can see in figure 4.

M is the dipole moment of one chain or of a part of it. We suppose $n \rightarrow \infty$ and calculate in this case the dipole moment M_m resulting from the first m ions and the electrons about them.

This dipole moment is, if we take the positive orientation outwards of the surface, (fig. 5.)

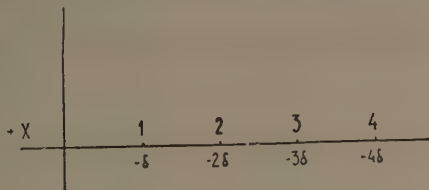


Figure 5. Coordinates below the surface.

$$M_m = \sum_{k=1}^m (-k\delta e) + \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} \varrho x (-e) d\tau, \quad (6.5)$$

where e is the elementary charge.

Here $0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta$ means integration over the whole space left of the plane $x = - (m + \frac{1}{2})\delta$. The sum in (6.5) gives easily

$$\sum_{k=1}^m (-k\delta e) = -e\delta \sum_{k=1}^m k = -e\delta \frac{m(m+1)}{2}. \quad (6.6)$$

Taking (5.21) into account, the integral in (6.5) can be written:

$$\begin{aligned} \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} \varrho x (-e) d\tau &= \sum_{k=1}^n D_k \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} |\psi_k|^2 x (-e) d\tau + \\ &+ \sum_{k=1}^{n-1} d_k \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} \mathcal{R}(\psi_k \psi_{k+1}^*) x (-e) d\tau = - \sum_{k=1}^n e D_k \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} |\psi_k|^2 x d\tau - \\ &- \sum_{k=1}^n e d_k \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} \mathcal{R}(\psi_k \psi_{k+1}^*) x d\tau. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Now $|\psi_k|^2$ is symmetrical about the plane $x = -k\delta$ and vanishes exponentially from this plane. So we can transform the first integral occurring in (6.7) as follows:

$$\int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} |\psi_k|^2 x d\tau = \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} |\psi_k|^2 (x + k\delta) d\tau - \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta}^{\infty} |\psi_k|^2 k\delta d\tau = -k\delta \quad (6.8)$$

if $k \leq m$, and vanishes otherwise, since the first integral vanishes as the integrand is a product of a symmetrical and an antisymmetrical function and the second integral is 1 because of the normalization.

Similarly $\mathcal{R}(\psi_k \psi_{k-1}^*)$ is symmetrical about the plane $x = -(k + \frac{1}{2})\delta$ and vanishes exponentially from this plane. So the second integral gives

$$\begin{aligned} \int_{0, \dots, -(m - \frac{1}{2})\delta} \mathcal{R}(\psi_k \psi_{k-1}^*) x d\tau &= \int_{0, \dots, -(m - \frac{1}{2})\delta} \mathcal{R}(\psi_k \psi_{k-1}^*) \left(x + k\delta + \frac{1}{2}\delta \right) d\tau - \\ &- \int_{0, \dots, -(m - \frac{1}{2})\delta} \mathcal{R}(\psi_k \psi_{k-1}^*) \left(k + \frac{1}{2} \right) \delta d\tau = - (k + \frac{1}{2}\delta) \int_{0, \dots, -(m - \frac{1}{2})\delta} \mathcal{R}(\psi_k \psi_{k-1}^*) d\tau. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Now this last integral gives S for $k \leq m-1$, $\frac{S}{2}$ for $k=m$ and vanishes otherwise. So we can write for (6.7):

$$\begin{aligned} \int_{0, \dots, -(m + \frac{1}{2})\delta} \varrho x (-e) d\tau &= \\ &= e\delta \sum_{k=1}^m k D_k + e\delta S \sum_{k=1}^{m-1} (k + \frac{1}{2}) d_k + e\delta S \frac{m + \frac{1}{2}}{2} d_m. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Using (5.33) and (5.35) we obtain:

$$\begin{aligned} \int_{0, \dots, -(m + \frac{1}{2})\delta} \varrho x (-e) d\tau &= e\delta \sum_{k=1}^m k (E_0 - E_{2k}) + \\ &+ e\delta S \sum_{k=1}^{m-1} (k + \frac{1}{2}) 2 (E_{2k-1} - E_1) + e\delta S \frac{m + \frac{1}{2}}{2} d_m = \\ &= e\delta E_0 \sum_{k=1}^m k - e\delta S E_1 \sum_{k=1}^{m-1} (2k+1) + e\delta S \frac{m + \frac{1}{2}}{2} d_m - \\ &- e\delta \sum_{k=1}^m k E_{2k} + e\delta S \sum_{k=1}^{m-1} (2k+1) E_{2k-1} = \\ &= e\delta E_0 \frac{m(m+1)}{2} - e\delta S E_1 (m+1)(m-1) + e\delta S \frac{2m+1}{4} d_m + \\ &+ e\delta S \sum_{k=1}^{m-1} k (E_{2k-1} - \frac{1}{S} E_{2k} + E_{2k-1}) - e\delta m E_{2m} - \\ &- e\delta S E_1 + e\delta S m E_{2m-1} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= e\delta E_0 \frac{m(m+1)}{2} - e\delta SE_1(m+1)(m-1) + e\delta S \frac{2m+1}{4} d_m + \\
 &+ e\delta Sm(E_{2m+1} - \frac{1}{S} E_{2m} + E_{2m-1}) - e\delta SE_1 - e\delta SmE_{2m+1} + \\
 &+ e\delta S \sum_{k=1}^{m-1} k(E_{2k+1} - \frac{1}{S} E_{2k} + E_{2k-1}). \quad (6.11)
 \end{aligned}$$

Now, with (5.37), we have

$$\begin{aligned}
 \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta} \varrho x(-e) d\tau &= e\delta E_0 \frac{m(m+1)}{2} - e\delta SE_1(m+1)(m-1) + \\
 &+ e\delta S \frac{2m+1}{4} d_m - e\delta SE_1 - e\delta SmE_{2m+1}. \quad (6.12)
 \end{aligned}$$

Using (5.50) and (5.35), this reduces to

$$\begin{aligned}
 \int_{0 \dots - (m + \frac{1}{2})\delta} \varrho x(-e) d\tau &= e\delta \frac{m(m+1)}{2} (E_0 - 2SE_1) + \\
 &+ e\delta SE_1(m+1) + e\delta S \frac{2m+1}{4} d_m - e\delta SE_1 - e\delta SmE_{2m+1} = \\
 &= e\delta \frac{m(m+1)}{2} + e\delta Sm(E_1 - E_{2m+1}) + e\delta S \frac{2m+1}{4} d_m = \\
 &= e\delta \frac{m(m+1)}{2} + \frac{e\delta S}{4} d_m. \quad (6.13)
 \end{aligned}$$

(6.5) gives thus with (6.6) and (6.13):

$$M_m = \frac{e\delta S}{4} d_m. \quad (6.14)$$

It is easily shown that d_m is always positive for $m \rightarrow \infty$, so that M_m is positive for this case. With (6.1) and (6.2)—(6.4) this means that there is a rise in the potential if we get out from the metal through the surface. This is equivalent to a lower energy for a free electron in the outer part of the metal, compared to that inside the metal. This effect helps an electron situated freely inside the metal to get out of it. But since the highest term filled in the energy scheme at absolute zero is Q , the ionization energy, we can release an electron inside the metal by this energy.

The work function can be thus obtained by the difference of the ionization energy (negative of the highest filled energy term) and the energy gained by transmitting an electron through the chain from its inside to its outside.

For a simple cubic structure we have thus from (6.1), (6.2) and (6.14) for the work function w :

$$w = -Q - 4\pi e \frac{e\delta S}{4\delta^2} d_{\infty} = -Q - \frac{\pi e^2 S d_{\infty}}{\delta}, \quad (6.15)$$

or with (5.55)

$$w = -Q - \frac{e^2}{\delta} \left(\pi - \frac{2 \arccos 2S}{\sqrt{1-4S^2}} \right). \quad (6.16)$$

With the expression (6.14) we can as well calculate explicitly the effect of the outermost layer. We must take only $m=1$ in the dipole energy calculated. Then we get for the energy contributing to the work function by this layer w_s (in the literature simply called surface dipole layer):

$$w_s = -4\pi e \frac{e\delta S}{4\delta^2} d_1 = -\frac{\pi e^2 S d_1}{\delta}. \quad (6.17)$$

If we define the surface dipole moment, μ , as the dipole moment of the unit area of this outermost layer, we obtain for a simple cubic lattice from (6.2) and (6.14):

$$\mu_1 = \frac{M_1}{\delta^2} = \frac{e S d_1}{4\delta}. \quad (6.18)$$

If this moment is positive, this lowers the work function, if it is negative it increases it. In reality this surface dipole moment has no meaning in an ideal crystal of atoms of one type, since it is only a part of the expression (6.15) which can be evaluated at once. There is no sense in our taking the first layer of atoms only, because the first two layers give another surface dipole moment (d_2 instead of d_1 in (6.18)), so that we cannot give an acceptable definition of the surface dipole moment for a pure metal.

The expression (6.16) contains, however, the effect of the surface dipole moment in the sense used in the literature[7].

Naturally, as our definition is different from that in the literature our results cannot be compared with those results. Indeed, the literature contains the conclusion, that the surface dipole moment is very small (about 0.5–1 eV in the work function), whereas in our definition it plays a great part in the lowering effect of the work function.

A real meaning will be attributed to this problem only if we regard monolayers of strange atoms on the surface of the crystal.

In this paper we have restricted ourselves to problems containing atoms of only one kind. In a forthcoming paper we shall discuss the problems relating to atoms of different kinds. Also the numerical results will be given in a subsequent paper; further, the same problems in space will be discussed later.

We are indebted to Zs. Náray for drawing the figures.

REFERENCES •

1. A. Sommerfeld, *Zs. f. Phys.* **47**, 1 (1928).
2. E. Riecke, *Ann. d. Phys. u. Chem.* **66**, 353 and 545 (1898); P. Drude, *Ann. d. Phys.*, 687 (1902); H. A. Lorentz, *Theory of Electrons*, Leipzig (1909).
3. L. Nordheim, *Ann. d. Phys.* **9**, 607 (1931); F. Bloch, *Zs. f. Phys.* **52**, 555 (1928); **57**, 545 (1929); **59**, 208 (1930); **61**, 206 (1931); E. P. Wigner and F. Seitz, *Phys. Rev.* **43**, 104 (1933); **46**, 509 (1934); G. E. Kimball, *J. of Chem. Phys.* **3**, 560 (1935) etc.
4. Fröhlich, *Elektronentheorie der Metalle*, Berlin (1937).
5. H. Eyring, J. Walter, G. E. Kimball, *Quantum Chemistry*, New-York (1944).
6. G. H. Hardy, *A Course of Pure Mathematics*, 7th ed., Cambridge (1938), p. 392.
7. F. Seitz, *The Modern Theory of Solids*, New-York (1940) pp. 395—400.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

I. Линейная цепь однородных атомов.

(Т. Гоффман—А. Коня)

(Резюме)

Исследуем линейную цепь однородных атомов, в аппроксимации «линейной комбинации атомных орбит» метода молекулярных орбит. Просто вычислима энергия либо конечной, либо бесконечной цепи. Подобным способом можно вычислить собственную функцию, и делать выводы относительно поверхностных эффектов, например относительно работы выхода и дополнительного слоя.

SEARCH FOR PERIODICITIES

By

L. JÁNOSSY

DUBLIN INSTITUTE FOR ADVANCED STUDIES.

(Received: 16. V. 1950.)

Methods for the search of periodic components contained in a given material are discussed. While the method of Fuhrich is found to be impracticable it is shown that the old method of W. Schmidt, with some small modifications, is an excellent practical method for finding predominant periodic components.

§1. The problem often arises whether or not a given observational material contains periodic components. Consider N observed values y_0, y_1, \dots, y_{N-1} . It is always possible to represent these data exactly by a Fourier series which may be written as

$$\left. \begin{aligned} y_\nu &= \frac{1}{2}A_0 + \sum_{k=0}^{<\frac{1}{2}N} A_k \cos(\nu k\omega - \varphi_k) \\ 0 &\leq \varphi_k < 2\pi, \quad A_k \geq 0, \quad \text{for } k > 0; \quad \omega = \frac{2\pi}{N} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

or, alternatively,

$$\left. \begin{aligned} y_\nu &= \frac{1}{2}A_0 + \sum_{k=1}^{<\frac{1}{2}N} a_k \cos \nu k\omega + b_k \sin \nu k\omega \\ a_k &= A_k \cos \varphi_k \quad b_k = A_k \sin \varphi_k \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

A convenient way of writing the series is obtained by using complex notation; we may write

$$\left. \begin{aligned} y_\nu &= \sum_{k=0}^{N-1} A_k \exp(i\nu k\omega) \\ A_k &= A_k \exp(i\varphi_k) \quad k > 0, \quad A_0 = \frac{1}{2}A_0 \\ A_{N-k} &= A_k^* = A_k \exp(-i\varphi_k) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

From the theory of the Fourier series it follows that

$$\left. \begin{aligned} A_k &= \frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-1} y_\nu \exp(i\nu k\omega) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-1} y_\nu \cos \nu k\omega - \frac{i}{N} \sum_{\nu=1}^{N-1} y_\nu \sin \nu k\omega \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Now at the Institute for Experimental Physics Eötvös Lóránt University, Budapest

$$\begin{aligned} A_k + iB_k &= A_k \\ \frac{1}{2}A_0 &= A_0 \end{aligned} \quad (5)$$

The Fourier components can be evaluated easily using tables of $\cos \omega k$ and $\sin \omega k$ as computed e.g. by L. W. Pollak [1].

§2. The equations (1), (2) or (3) show each in a slightly different manner the well-known fact that any material can be looked upon as the superposition of periodic elements. Searching for periods one is therefore not so much concerned with the question whether a given material can be superposed of periodic components — this is always so — but one is interested whether there are among the periodic elements $A_k \exp(i\omega k v)$ any with exceptionally large amplitudes giving a predominant contribution to the observational values y_v .

Thus plotting the absolute squares of the amplitudes $|A_k|^2$ against k one may find exceptionally large values for say $k = k_1, k_2, \dots$ etc. and one might infer that the material contains significant periodic elements with periods near $\omega_1 = k_1\omega, \omega_2 = k_2\omega, \dots$ etc. One must be careful when concluding that the material contains significant periods with frequencies $\omega_1, \omega_2, \dots$ etc. i. e. when concluding that these periods are inherent to the mechanism producing the values y_v . *To decide whether a large amplitude A_k is significant or not, the physical details of the process giving rise to the observations have to be considered.*

Therefore, when searching for periods the object of the search is merely to find out whether or not the material can be approximated to a high degree as the superposition of a small number of harmonic components. Once such an approximation has been obtained, a systematic investigation is necessary so as to determine whether or not such harmonic components can be assumed to be physically significant. From the Fourier coefficients alone, knowing nothing about the process, no conclusion as to the significance of a period can be made. Indeed, considering the extreme case of a pure sine-wave, it is clear that we cannot conclude a priori that observations which were represented by a sine function inside an interval can be represented by the same function outside the interval, as the function might either continue or change abruptly into any other function. The present investigation is purely formal as it deals with the mathematical problem how to represent a given material by harmonic components. The much deeper physical problem as to the significance of such a representation cannot be dealt with here.

§3. The Fourier spectrum of a given material may be determined according to (4) and (5) and the largest amplitudes can be identified tentatively with periodicities. The Fourier analysis gives of course only frequencies which are integer multiples of $\omega = 2\pi/N$, the basic frequency. If adjacent frequen-

cies with large amplitudes occur, these can be grouped together to non-harmonic or fractional frequencies in the following way.

Suppose for the moment the y_v 's can be represented by

$$y_v = \exp \{ i (K + \varepsilon) \omega v \} \quad (6)$$

with K an integer and $-\frac{1}{2} < \varepsilon \leq +\frac{1}{2}$

Introducing (6) into (5) we have

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{N} \sum_{v=0}^{N-1} \exp \{ i (K + \varepsilon - k) \omega v \} \\ &= \frac{1}{N} \exp \left\{ \pi i \left(\varepsilon - \frac{K + \varepsilon - k}{N} \right) \right\} \frac{\sin \pi / \varepsilon}{\sin \frac{1}{2} (K - k + \varepsilon) \omega} \end{aligned}$$

and

$$|A_k|^2 = \left(\frac{\sin \varepsilon \pi}{N \sin \left(\frac{K - k + \varepsilon}{N} \right) \pi} \right)^2$$

$|A_k|^2$ has its maximum for $k = K$, where

$$|A_k|^2 \approx \left(\frac{\sin \varepsilon \pi}{\varepsilon \pi} \right)^2$$

$$\left(\text{Note that for } N \gg 1, \sin \frac{\varepsilon \pi}{N} \approx \frac{\varepsilon \pi}{N} \right)$$

Writing $K - k = \Delta K$ we find, provided $|\Delta K| \ll N$, that

$$\left| \frac{A_{K + \Delta K}}{A_K} \right|^2 \approx \frac{1}{(1 + \Delta K/2)^2} \quad (7)$$

This shows that provided ε is positive

$$|A_{K-1}|^2$$

is comparatively large. Similarly for negative ε

$$|A_{K+1}|^2$$

may be large. Thus a non-harmonic frequency is represented by a spectrum of Fourier coefficients the neighbouring harmonic frequencies being the largest values. From (7) we find

$$\varepsilon = \frac{\pm |A_{K+1}|}{|A_K| + |A_{K \pm 1}|} \quad (8)$$

Making use of (7) and (8) (or the corresponding exact relations) we can express a given Fourier spectrum in terms of one or more patterns arising from non-harmonic frequencies. Roughly speaking, pairs of large amplitudes corresponding to neighbouring frequencies ωK and $\omega(K+1)$ can be attributed to one non-harmonic frequency $\omega(K+\varepsilon)$.

Similarly there are typical patterns which indicate either a damped oscillation or oscillations with random changes of phase.

§ 4. We see thus that as the result of a Fourier analysis one can determine in a more or less unique way a number of frequencies $\omega_1, \omega_2 \dots$ etc. (harmonic or non-harmonic) representing the observational material in as good an approximation as desired. The procedure is, however, purely formal and the question as to the significance of the periods cannot be decided on formal grounds alone. The above considerations leave the impression that a complete Fourier analysis together with the consideration of prominent pairs or groups of amplitudes exhausts a given observational material. Any prominent period contained in a material ought to show itself in the Fourier spectrum. Therefore methods for the search of periods other than straight-forward Fourier analysis can only be regarded as useful provided they allow to find periodic components by an amount of work much less than a complete Fourier analysis. It seems to be quite unreasonable to expect that a procedure, however elaborate, should be capable of »proving« the existence of a hidden period which does not show in the complete Fourier spectrum.

§ 5. A complete Fourier spectrum can be obtained easily from a not too large material by making use of auxiliary tables. However, the amount of work increases with the square of the number of entries and therefore methods of finding the most important components out of a large material without the necessity of a complete Fourier analysis are desirable. In the following we discuss two such methods.

(1) *The Fuhrich Method*[2]. This method is an elaboration of the well-known auto-correlation method. Given the data y_1, y_2, \dots successive correlation coefficients are formed

$$\eta_k = \frac{\sum_{v=0}^{N-1} y_v y_{v+k}}{\left\{ \sum_{v=0}^{N-1} y_v^2 \sum_{v=0}^{N-1} y_{v+k}^2 \right\}^{1/2}} \quad k = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Submitting the η_1, η_2 to the process (9), a new set of values, say $\eta_1^{(1)}, \eta_2^{(1)} \dots$ is obtained. The procedure can be repeated and it is claimed that the set of

γ_ν 's converges after a sufficient number of iterations towards $\cos \omega_1 \nu$ where ω_1 is the frequency which has the largest amplitude in the set of the original γ_k 's. We shall investigate this claim further below. For the moment, we wish to point out that comparing (9) with (5) it is clear that one step in the Fuhrich method requires more work than a complete Fourier analysis (we assume that auxiliary tables for the Fourier analysis are available). Therefore the full procedure proposed by Fuhrich requires far more work than the complete Fourier analysis; the result of this large amount of work is at best the determination of *one relevant frequency*. Thus we can see no advantage in applying this method in practice (see also last paragraph).

(2) *The Method of Kryloff and Schmidt* [3]. Consider a function

$$f(x) = A_1 \sin(\omega_1 x + \varphi_1) + A_2 \sin(\omega_2 x + \varphi_2) + \dots \quad (10)$$

Integrating (10) $2n$ times with respect to x , we have

$$\begin{aligned} (-1)^n \int \dots \int f(x) dx^{2n} = & \frac{A_1}{\omega_1^{2n}} \sin(\omega_1 x + \varphi_1) + \frac{A_2}{\omega_2^{2n}} \sin(\omega_2 x + \varphi_2) + \\ & + C_0 + C_1 x + \dots + C_{2n-1} x^{2n-1} \end{aligned} \quad (11)$$

The $C_0, C_1, \dots, C_{2n-1}$ are constants of integration. Neglecting the polynomial $C_0 + C_1 x + \dots$ for the moment, we find that the $2n$ times integrated function contains the same periods $\omega_1, \omega_2 \dots$ as the original function $f(x)$, but the amplitudes are changed by the integration; the smaller the corresponding frequency, the more are the amplitudes increased in their relative importance. Thus, as far as the polynomial $C_0 + C_1 x + \dots$ can be disposed of, one might hope that as a result of subsequent integrations the period with the lowest frequency might become predominant as a result of several integrations. Once an important frequency is recognised, it can be subtracted from $f(x)$, and the remaining function $g(x) = f(x) - A_1 \sin(\omega_1 x + \varphi_1)$ can be subjected to the same procedure. Thus important frequencies can be predicted one by one. Schmidt's procedure encounters, however, difficulties, as shown by Rubinstein[4]. It is not possible to eliminate the polynomials $C_0 + C_1 x + \dots$ with sufficient accuracy. Even a small error in one step is bound to give rise to large errors in subsequent steps and fortuitous frequencies may thus be obtained. While the above criticism of Rubinstein is justified, we shall give in the following section a method, very similar to that proposed by Schmidt, which is free of the difficulties of the above method.

Part II.

§ 6. We consider as in § 1. observed values $y_0, y_1 \dots y_{N-1}$ which can be represented by complex Fourier series

$$y_\nu = \sum_{k=0}^{N-1} A_k e^{i\omega k \nu}, \quad \omega = 2\pi/N \quad (12)$$

$$A_k = A_{N-k}^*$$

* denotes complex conjugate.

Writing equation (12), we do not assume the actual knowledge of the Fourier coefficients A_k , we just emphasize that such series exist.

We shall make frequent use of the following elementary relation

$$\sum_{k=0}^{n-1} e^{i\omega \nu k} \begin{cases} = \frac{1 - e^{i\omega \nu n}}{1 - e^{i\omega \nu}} & \nu \neq 0, N \\ = n & \nu = 0, N \end{cases} \quad (13)$$

and

$$\frac{1 - e^{i\alpha}}{1 - e^{i\beta}} = e^{\frac{1}{2}i(\alpha - \beta)} \frac{\sin \frac{1}{2}\alpha}{\sin \frac{1}{2}\beta} \quad (14)$$

With help of (12) and (13) we find

$$\frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-1} y_\nu = A_0$$

Thus putting

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-1} y_\nu \quad (15)$$

we may form deviations of the average

$$\eta_\nu^{(0)} = y_\nu - \bar{y} \quad \nu = 1, 2, \dots, N-1 \quad (16)$$

The $\eta_\nu^{(0)}$ are represented by a series which contains no constant term, namely

$$\eta_\nu^{(0)} = \sum_{k=1}^{N-1} A_k e^{i\omega k \nu} \quad (17)$$

Instead of the integration used by Schmidt we form partial sums as follows

$$\begin{aligned}
 y_{\frac{1}{2}}^{(1)} &= \eta_0^{(0)} \\
 y_{\frac{3}{2}}^{(1)} &= \eta_0^{(0)} + \eta_1^{(0)} \\
 &\vdots \\
 y_{N-\frac{1}{2}}^{(1)} &= \eta_0^{(0)} + \eta_1^{(0)} + \dots + \eta_{N-1}^{(0)}
 \end{aligned} \tag{18}$$

Equations (18) may also be written as

$$y_{v+\frac{1}{2}}^{(1)} = \sum_{k=0}^v \eta_k^{(0)} \tag{19}$$

We introduce now (17) into (19)

$$y_{v+\frac{1}{2}} = \sum_{k=0}^v \sum_{\mu=1}^{N-1} A_{\mu} e^{i\omega\mu k}$$

The summation over k can be carried out with help of (13) and we find

$$y_{v+\frac{1}{2}}^{(1)} = \sum_{\mu=1}^{N-1} A_{\mu} \sum_{k=0}^v e^{i\omega\mu k} = A_0^{(1)} + \sum_{\mu=1}^{N-1} A_{\mu} \frac{e^{i\omega\mu(v+\frac{1}{2})}}{1-e^{i\omega\mu}}$$

with

$$A_0^{(1)} = \sum_{\mu=1}^{N-1} \frac{A_{\mu}}{1-e^{i\omega\mu}} \tag{20}$$

By a simple transformation we find

$$y_{v+\frac{1}{2}}^{(1)} = A_0^{(1)} + \sum_{\mu=1}^{N-1} \frac{A_{\mu} e^{i\omega\mu(v+\frac{1}{2})}}{(2i \sin \frac{1}{2} \omega\mu)} \tag{21}$$

thus the iterated values $y_{v+\frac{1}{2}}^{(1)}$ can be represented again by a Fourier series where the new coefficients $A_k^{(1)}$ have simple connections with the original coefficients A_k .

§ 6. We note further that the iteration has caused a phase shift of one half of an original step. We have expressed this shift by using half integer suffixes for the $y^{(1)}$'s. In analogy with Schmidt's procedure, we repeat the iteration. To do so, it is better not to repeat exactly the procedure described by equations (15) to (19) as this would further increase the phase shift. Instead, we propose the following very similar procedure for the second iteration:

(1) Take averages

$$\begin{aligned}\eta_{\nu+\frac{1}{2}}^{(1)} &= y_{\nu+\frac{1}{2}}^{(1)} - y^{(1)} \\ \bar{y}^{(1)} &= \frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-1} y_{\nu+\frac{1}{2}}^{(1)}\end{aligned}\quad (22)$$

(2) Form partial sums

$$y_0^{(2)} = 0 \quad (23)$$

$$y_1^{(2)} = \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)}$$

$$y_2^{(2)} = \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} + \eta_{\frac{3}{2}}^{(1)}$$

.

.

.

$$y_{N-1}^{(2)} = \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} + \dots + \eta_{N-\frac{3}{2}}^{(1)}$$

We can also write instead of (23)

$$y_0^{(2)} = 0, \quad y_\nu^{(2)} = \sum_{k=0}^{\nu-1} y_{k+\frac{1}{2}} \quad \nu = 1, 2, \dots, N-1 \quad (24)$$

With the aid of (21) and (22) we can show that $y_\nu^{(2)}$ defined by (24) are represented by the following Fourier series

$$y_\nu^{(2)} = A_0^{(2)} - \sum_{\mu=1}^{N-1} \frac{A_\mu e^{i\omega\mu\nu}}{(2 \sin \frac{1}{2}\mu\omega)^2} \quad (25)$$

$A_0^{(2)}$ is given by an expression somewhat similar to the one for $A_0^{(1)}$ (equ. (20)); the expression is, however, uninteresting as the numerical value of $A_0^{(2)}$ is obtained as the average over the $y_\nu^{(2)}$'s.

§ 7. In the last two paragraphs we have given a scheme of iterations not unlike that used by Schmidt (see § 5, 2). For the sake of clarity we reproduce the full scheme in the following table.

Table I.
THE SCHEME OF ITERATIONS

ν	$y_p^{(0)}$	$\eta_p^{(0)}$	$y_{\nu+\frac{1}{2}}^{(1)}$	$\eta_{\nu+\frac{1}{2}}^{(1)}$	$y_p^{(2)}$	$\eta_p^{(2)}$
0	$y_0^{(0)}$	$\eta_0^{(0)} = y_0^{(0)} - \bar{y}$	$y^{(1)} = \eta_0$ $\frac{1}{2}$	$\eta_2^{(1)} = y_1^{(1)} - \bar{y}^{(1)}$	$y_0^{(2)} = 0$	$\eta_0^{(2)} = y_0^{(2)} - \bar{y}^{(2)}$
1	$y_1^{(0)}$	$\eta_1^{(0)} = y_1^{(0)} - \bar{y}$	$y^{(1)} = \eta_0 + \eta_1$ $\frac{3}{2}$	$\eta_2^{(1)} = y_2^{(1)} - \bar{y}^{(1)}$	$y_1^{(2)} = \eta_1^{(1)}$ $\frac{1}{2}$	$\eta_1^{(2)} = y_1^{(2)} - \bar{y}^{(2)}$
2	$y_2^{(0)}$	$\eta_2^{(0)} = y_2^{(0)} - \bar{y}$	$y^{(1)} = \eta_0 + \eta_1 + \eta_2$ $\frac{5}{2}$	$\eta_2^{(1)} = y^{(1)} - \bar{y}^{(1)}$	$y_2^{(2)} = \eta_1^{(1)} + \eta_2^{(1)}$ $\frac{3}{2}$	$\eta_2^{(2)} = y_2^{(2)} - \bar{y}^{(2)}$
.
.
.
.
$N-1$	$y_{N-1}^{(0)}$	$\eta_{N-1}^{(0)} = y_{N-1}^{(0)} - \bar{y}$	$y_{N-\frac{1}{2}}^{(1)} = \eta_0 + \eta_1 + \dots + \dots \eta_{N-1}$	$\eta_{N-\frac{1}{2}}^{(1)} = y_{N-\frac{1}{2}}^{(1)} - \bar{y}^{(1)}$	$y_{N-1}^{(2)} = \eta_1^{(1)} + \eta_2^{(1)} + \dots + \dots \eta_{N-\frac{3}{2}}^{(1)}$	$\eta_{N-1}^{(2)} = y_{N-1}^{(2)} - \bar{y}^{(2)}$
Remarks and definitions	$y = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} y_p^{(0)}$	$\sum_{p=0}^{N-1} \eta_p^{(0)} = 0$	$y^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} y_p^{(1)}$ $y_{N-1}^{(1)} = 0$	$\sum_{p=0}^{N-1} \eta_{p+\frac{1}{2}} = 0$	$\bar{y}^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} y_p^{(2)}$	$\sum_{p=0}^{N-1} \eta_p^{(2)} = 0$

Starting from an original set of values y_v , $v=0, \dots, N-1$ we can thus form iterated series

$$\begin{array}{lll}
 \eta_0^{(2)}, \eta_1^{(2)}, \dots & \eta_{N-1}^{(2)} & \text{2nd iteration} \\
 \eta_0^{(4)}, \eta_1^{(4)}, \dots & \eta_{N-1}^{(4)} & \text{4th iteration} \\
 \cdot & \cdot & \\
 \cdot & \cdot & \\
 \cdot & \cdot & \\
 \eta_0^{(2m)}, \eta_1^{(2m)} & \eta_{N-1}^{(2m)} & \text{2m th iteration}
 \end{array}$$

so that the following Fourier representation holds exactly

$$\eta_v^{(2m)} = (-)^m \sum_{\mu=1}^{N-1} \frac{A_\mu}{(2 \sin \frac{1}{2} \omega \mu)^{2m}} e^{i \omega \mu v} \quad (26)$$

The analogy between the old equation (11) and our new equation (26) is striking. The differences between the two schemes are as follows:

- (1) We have got rid exactly of the integration constants C_0, C_1, \dots ; $A_0^{(2m)}$ is eliminated *exactly* when introducing deviations from the average.
- (2) Instead of the denominators ω_μ^{2m} in (11) we have now $(2 \sin \frac{1}{2} \omega \mu)^{2m}$; for $\mu \ll N$ we have approximately $2 \sin \frac{1}{2} \omega \mu \sim \omega \mu$.
- (3) The method does not reinforce arbitrary frequencies but only harmonic frequencies.

The first feature is a great advantage of the new method as the indeterminacy of the integration constants was the main shortcoming of the old method. It should be emphasized, however, that our method, though exact, is sensitive to rounding-off errors. It is therefore necessary in practice to attach two or three zeros to the original material and carry out the computation with an accuracy exceeding that of the original material. In table 2 three zeros have been attached to the original y_v values

(2) is caused by the fact that we have replaced integration by summation; the error in Schmidt's procedure caused by the approximate nature of numerical integration is thus eliminated.

(3) The disadvantage that only harmonic frequencies can be obtained is compensated by the uniqueness of the procedure. At closer examination it appears to us that in fact Schmidt's procedure can hardly give more than nearest harmonics. The effects of the ends of the interval and of numerical integration are not considered exactly by Schmidt. The errors which arise from these inaccuracies blur the results just sufficiently so as to prevent discrimination between harmonic and unharmonic frequencies. In our procedure, where these inaccuracies are eliminated, the iteration leads exclusively to harmonic frequencies.

Part III.

A Numerical Example

§ 8. If ωk is the smallest frequency occurring in the Fourier spectrum of a material then as the result of a sufficient number of iterations, this frequency will become predominant and we find from (26)

$$\eta_{\nu}^{(2m)} \approx (-)^m \frac{A_k e^{i\omega k \nu} + A_{N-k} e^{-i\omega k \nu}}{(2 \sin \frac{1}{2} \omega k)^{2m}} = (-)^m \frac{2|A_k| \cos(\omega k \nu + \varphi_k)}{(2 \sin \frac{1}{2} \omega k)^{2m}} \quad (27)$$

(For our purpose the frequencies ωk and $\omega(N-k)$ are of course the same.)

From equation (27) we can obtain approximate values of the phase φ_k and amplitude A_k as follows. With the aid of (13) we find

$$\frac{1}{N} (2 \sin \frac{1}{2} \omega k)^{4m} \sum_{\nu=0}^{N-1} \eta_{\nu}^{(2m)^2} \approx 2A_k A_{N-k} = 2A_k^2 \quad (28)$$

and, similarly,

$$\frac{1}{N} (2 \sin \frac{1}{2} \omega k) \sum_{\nu=0}^{N-1} \eta_{\nu}^{(2m)} \eta_{N-\nu}^{(2m)} = A_k^2 + A_{N-k}^2 = A_k^2 \cos 2\varphi_k \quad (29)$$

Thus

$$\cos 2\varphi_k \approx \frac{\frac{1}{2} \sum_{\nu=0}^{N-1} \eta_{\nu}^{(2m)^2}}{\sum_{\nu=0}^{N-1} \eta_{\nu}^{(2m)} \eta_{N-\nu}^{(2m)}} \quad (30)$$

As will be seen further below, (28) and (30) give a fairly good approximation of A_k and φ_k , often even for $m=1$. (30) permits only the determination of $\cos 2\varphi_k$; for any value of φ_k satisfying (30) there are three more possible values, namely

$$2\pi - \varphi_k, \quad \pi \pm \varphi_k. \quad (31)$$

By inspection of the values of the $\eta_{\nu}^{(2m)}$'s it is as a rule not difficult to select the correct value. Once the period ωk has been established, it can be eliminated exactly by subtraction. Indeed the values

$$\eta_{\nu}^{(0)} = \eta_{\nu}^{(0)} - (-)^m (2 \sin \frac{1}{2} \omega k)^{2m} \eta_{\nu}^{(2m)} \quad (32)$$

contain no term with the frequency ωk . In fact, equation (32) is correct whether ωk is »predominant« or not. Thus, starting from the $\overline{\eta}_{\nu}^{(0)}$ the procedure can be continued. Repeating the procedure one may eliminate one frequency after the other in a simple way. After a large number of steps the Fourier spectrum could be obtained eventually. However this would be a very roundabout way of getting the spectrum.

§ 9. In order to avoid misconceptions, we emphasize that the equations (28), (29) and (30), giving A_k and φ_k , simple as they are, require the same amount of computational work as the exact determination of A_k and φ_k from equation (5) provided harmonic tables for the frequencies ωk are available. Thus the actual use of (28), (29) and (30) can only be recommended if no tables for the frequencies $2\pi k/N$ are readily available. The actual advantage of the method is, however, the following:

The iterations described tend to give the lowest frequency present, provided the iteration is repeated sufficiently often. But, supposing there are a number of low frequencies present with small amplitudes; suppose e.g. that the frequency ωk is the lowest frequency with a large amplitude. In this case the iteration not too often repeated brings the frequency ωk out. Thus the practical procedure is to go on with iterations until the iterated values show a marked resemblance to a harmonic. At that stage the harmonic indicated by the iterated y_ν 's can be eliminated either by strict Fourier analysis (if tables are available) or by (28) and (30). For this purpose it will be unnecessary as a rule to go to a high order of iteration.

The fact that one has to rely on judgment as to what harmonic is represented by an iteration does not introduce any ambiguity into the procedure. If the wrong period is ascribed to a certain iteration, then the supposedly important frequency is eliminated instead of the really important one and the important frequency will appear more clearly in the course of subsequent iterations.

§ 10. In order to give a numerical example, we have investigated an example which was considered by Pollak in 1929. We have $N = 41$,

$$y_\nu = 8 \sin (36,09^\circ \nu) - 5 \sin (9,74^\circ \nu) + \text{random numbers.} \quad (31)$$

In the table below we reproduce $y_\nu^{(0)}$ and its 2nd and 4th iterations (see also fig. 1, 2, 3).

We have reproduced $y_\nu^{(0)}$, $\eta_\nu^{(2)}$, $y_\nu^{(4)}$ in fig. 1, 2, 3. Already $\eta_\nu^{(2)}$ shows clearly a strong first harmonic; there was no real need to compute $y_\nu^{(4)}$, we have done so only to show how rapidly the procedure converges. The iteration was repeated with $\zeta_\nu^{(0)}$ that is with the rest after the 1st harmonic was eliminated; the second iteration of $\zeta_\nu^{(0)}$ namely $\zeta_\nu^{(2)}$ shows a strong 4th harmonic. Repeating the iteration once more with the rest a comparatively weak 6th and 2nd harmonics are also obtained. See figs. 4, 5, 6 and 7. In the present case there is no difficulty in recognising the predominant frequencies. It is noteworthy that after the 1st harmonic immediately the 4th harmonic appears, although the actual material contains a weak second harmonic. Thus the iteration, if not repeated too often, picks out automatically the strong harmonics.

Part IV.

The Fuhrich Method

§ 11. The Fuhrich method consists in the successive application of the auto-correlation method. Correlation coefficients are computed between the values y_0, y_1, y_2, \dots and the values shifted by $0, 1, 2 \dots$ steps. The correlation coefficients represent the first iteration. Iterating several times in succession, the correlation coefficients tend towards a harmonic series representing the period with the largest amplitudes contained in the material.

As already pointed out, the amount of work involved in forming one set of correlation coefficients exceeds that of a complete Fourier analysis with the aid of tables; therefore the only justification for the Fuhrich method would be if it could find frequencies with greater precision than Fourier analysis. It seems to us unlikely that there should be any periodic property of a set of data which could not be found from a complete Fourier spectrum, if this property can be found at all from the given data alone; the claim of the Fuhrich method seems therefore suspect on general grounds. We can show, however, that in fact the Fuhrich method applied to a finite interval can give at best as much information as a Fourier analysis; this at the cost of very much more work than the actual Fourier analysis would involve.

§ 13. For the practical application of the Fuhrich method the original formula applying to an infinite interval must be modified so as to apply to a finite number of observations. In what follows, we consider several possibilities.

(1) We may continue the y_v values outside the given interval by simple repetition. Thus we may postulate

$$y_v = y_{v \pm N} = y_{v \pm 2N} = \dots \quad (32)$$

We have thus

$$y_v = \sum_{\mu=0}^{N-1} A_{\mu} e^{i\omega_{\mu} v} \quad \text{for any integer } v \quad (33)$$

Suppose for simplicity $A_0 = 0$

Thus

$$\frac{1}{N} \sum_{v=0}^{N-1} y_{v-k}^2 = \sum_{\mu=0}^{N-1} |A_{\mu}|^2 = \text{independent of } k$$

Thus the denominators in (9) are constant, and we may therefore put for the first iteration

$$y_k^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{v=0}^{N-1} y_v y_{v+k} \quad (34)$$

and with the aid of (33) and (13)

$$y_k^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-1} \sum_{\mu=1}^{N-1} \sum_{\mu'=1}^{N-1} A_{\mu'} A_{\mu+k} e^{i\omega[\nu\mu + (\nu+k)\mu']}$$

the terms with $\mu + \mu' \neq N$ cancel when summed over ν ; thus we have

$$\begin{aligned} y_k^{(1)} &= \sum_{\mu=1}^{N-1} A_{\mu} A_{N-\mu} e^{i\omega\mu k} \\ &= 2 \sum_{\mu=1}^{\frac{N}{2}} |A_{\mu}|^2 \cos \omega\mu k \end{aligned} \quad (35)$$

Repeating the iteration we have further

$$\zeta_k^{(m)} = 2^m \sum_{\mu=1}^{\frac{N}{2}} |A_{\mu}|^2 \cos \omega\mu k$$

For a sufficiently large value of m the largest coefficient A_k will become pre-dominant. So far, however, only exact Fourier frequencies are obtained.

(2) So as not to impose the periodicity condition from the beginning, one might try to drop (32) and to introduce correlation coefficients built from the values inside the original interval only. We may thus define the iteration not by (34) but instead as

$$y_k^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\nu=0}^{N-k-1} y_{\nu} y_{\nu+k} \quad (36)$$

However equation (36) is equivalent to (34), provided we postulate by definition

$$y_N = y_{N+1} = \dots = y_{2N-1} = 0$$

Thus the iteration (36) gives the harmonics of an extended interval of $2N$ entries, we therefore obtain as periods multiples of $\frac{1}{2}\omega$ and not only of ω . The fact that our frequency spectrum has thus been increased is no real advantage; the new frequencies are simply the harmonics of an arbitrarily extrapolated set of values.

(3) It may be argued that (36) does not really represent correlation coefficients, as the denominators contain only $N-k$ squares if no extrapolation out of the interval is made use of. We may consider as a better approximation instead of (36)

$$y_k^{(1)} = \frac{1}{N-k} \sum_{\nu=0}^{N-k-1} y_{\nu} y_{\nu+k} \quad (37)$$

The iteration (37) is very complicated mathematically. As can be shown easily, even if the y_{ν} are given by a pure harmonic the iterated values are no longer

Table II.

	$y_v^{(0)}$	$\eta_v^{(2)}$	$y_v^{(4)}$	$\zeta_v^{(0)}$	$\zeta_v^{(2)}$	$\alpha_v^{(0)}$	$\alpha_v^{(2)}$	$\beta_v^{(0)}$
0	-1,47000	43,77176	-1234,37648	0,09589	-29,98911	-10,32600	40,19157	-6,75480
1	10,61000	63,16167	-2424,98120	12,77001	-37,72889	-0,34163	42,45898	3,43104
2	2,82000	93,16515	-3552,42425	5,54260	-32,69866	-5,82092	44,38476	-1,87714
3	2,18000	125,99220	-4586,70215	5,41871	-22,12583	-2,27051	40,48962	1,32717
4	-4,16000	161,00282	-5494,98785	-0,46806	-6,13429	-2,59986	34,32397	0,44997
5	-10,37000	191,85701	-6242,27073	-6,30516	9,38919	-3,04221	25,55846	-0,77123
6	-11,62000	212,34477	-6797,69660	-7,27800	18,60751	-0,81147	13,75074	0,41034
7	-9,80000	221,21610	-7140,77770	-5,28680	20,54783	1,85403	1,13155	1,95457
8	-12,94000	220,29100	-7262,64270	-8,36599	17,20135	-2,38813	-9,63361	-3,2412
9	-3,16000	206,42947	-7164,21670	1,36489	5,48888	3,27240	-22,78691	1,24768
10	2,70000	189,41151	-6859,36123	7,07277	-4,85870	5,38426	-32,66780	2,48158
11	2,86000	175,09712	-6365,09425	6,98613	-8,13351	4,15955	-37,16443	0,85733
12	0,20000	163,64630	-5695,73015	3,99212	-4,42219	2,45331	-37,50151	-0,87686
13	-4,24000	152,39905	-4862,71975	-0,86356	3,28125	0,27675	-35,38328	-2,86721
14	-3,33000	136,91537	-3877,31030	-0,44528	10,12113	3,07204	-32,98830	0,14089
15	-3,26000	118,10526	-2754,98548	-0,93532	16,51573	4,80427	-27,52128	2,35888
16	-8,36000	96,03372	-1514,55540	-6,65430	21,97501	0,98251	-17,24999	-0,55023
17	-10,28000	65,61575	-178,08660	-9,24120	20,77999	-2,01969	-5,99619	-0,25548
18	-3,39000	24,91635	1223,99795	-3,05084	10,34377	0,54385	3,23792	0,83155
19	-0,79000	-19,16948	2650,99885	-1,16291	-3,14329	-2,25527	13,01588	-1,09875
20	5,67000	-64,04174	4058,83027	4,59458	-17,79326	-1,58898	20,53857	0,23596
21	8,17000	-103,24043	5402,61995	6,42402	-27,84865	-3,25401	26,47228	-0,90183
22	14,64000	-134,26555	6643,16920	12,27499	-31,48002	1,33498	29,15198	3,92526
23	9,13000	-150,64710	7749,45290	6,21295	-22,83640	-1,72321	33,16666	1,22379
24	2,80000	-157,89508	8705,08950	-0,59391	-7,97983	-3,36708	35,45813	-0,21647

25	—	3,53000	—	162,33949	—	7,32199	—	6,28283	—	5,13857	—	34,38252	—	2,06353
26	—	2,09000	—	170,31033	—	6,19906	—	13,23350	—	1,60360	—	28,16834	—	0,89928
27	—	2,83000	—	180,36760	—	7,17114	—	13,96511	—	2,31795	—	20,35056	—	0,50971
28	—	1,16000	—	193,25130	—	3,32321	—	7,53558	—	0,70443	—	10,21483	—	0,20320
29	—	1,69000	—	204,97143	—	2,83886	—	2,21716	—	3,60937	—	0,62533	—	3,66493
30	—	12,94000	—	214,99799	—	8,46778	—	14,80876	—	3,32140	—	15,07486	—	1,98193
31	—	14,12000	—	212,08098	—	9,81170	—	18,93258	—	3,23220	—	26,20299	—	0,90395
32	—	12,24000	—	195,04040	—	8,20145	—	13,24470	—	3,59862	—	34,09892	—	0,56878
33	—	5,40000	—	165,75625	—	1,72852	—	0,64463	—	1,95254	—	38,39623	—	1,45913
34	—	2,83000	—	131,06853	—	0,39139	—	16,26248	—	5,26019	—	40,74100	—	1,64017
35	—	9,61000	—	93,54724	—	12,31650	—	31,48894	—	1,37339	—	37,82558	—	4,73436
36	—	3,12000	—	65,63238	—	5,26463	—	34,39890	—	6,68976	—	36,28355	—	3,46581
37	—	7,66000	—	40,83395	—	9,21001	—	32,04423	—	1,92608	—	28,05176	—	0,56644
38	—	1,31000	—	23,69195	—	2,24501	—	20,47955	—	4,87209	—	17,89389	—	3,28214
39	—	1,27000	—	7,85638	—	1,57819	—	6,66986	—	0,73974	—	2,86393	—	0,48527
40	—	1,63000	—	6,71276	—	1,95255	—	8,71802	—	1,07716	—	12,90577	—	0,06957
41	—	4,65000	—	22,91547	—	5,59994	—	22,15335	—	2,09885	—	27,59831	—	0,35338

$y_v^{(0)}$ original values, $\eta_v^{(2)}, y_v^{(4)}$ first and second iterations; shows first harmonics.

See figs 1, 2, 3

first remainder and iteration; shows fourth harmonics See figs 4, 5

$\alpha_v^{(0)}, \alpha_v^{(2)}$ second remainder and iteration shows second harmonics See figs 6, 7

$\beta_v^{(0)}$ third remainder

exact harmonics. There are, however, a set of frequencies which are reproduced by (37) exactly. Indeed, consider

$$y_\nu = e^{i\Omega\nu} + e^{-i\Omega\nu} \quad (38)$$

where Ω is an arbitrary frequency.

We find from (37) and (38)

$$\begin{aligned} y_k^{(1)} &= \frac{1}{N-k} \sum_{\nu=0}^{N-k-1} \left\{ e^{ik\Omega} + e^{-ik\Omega} + e^{i(2\nu+k)\Omega} + e^{-i(2\nu+k)\Omega} \right\} \\ &= 2 \cos k\Omega + \frac{1}{N-k} \sum_{\nu=0}^{N-k-1} \left\{ e^{i(2\nu+k)\Omega} + e^{-i(2\nu+k)\Omega} \right\} \end{aligned}$$

The above expression is then and only then a pure harmonic if the second term vanishes identically in k . It can be shown with the aid of (13) and (14) that the sum vanishes provided

$$e^{i\Omega(N-\frac{3}{2})} = -1$$

that is for

$$\Omega = \Omega_K = \frac{(2K+1)\pi}{N-\frac{3}{2}} \quad K = 0, 1, 2, \dots \quad (39)$$

Therefore (37) provides something like an analysis into frequencies Ω_k $k=1, 2, \dots$. However, as the procedure is non-linear, the combination of two frequencies (39) gives rise to a spectrum of combination frequencies. As any of these frequencies might be reinforced by a chance constellation, it seems (unless the contrary is proved) that repetition of (37) may lead to spurious frequencies. We cannot help feeling that (37), apart from being elaborate, does not have a clear significance and cannot be recommended.

(4) The iteration proposed by Fuhrich and Pollak is

$$y_\nu^{(1)} = \sum_{\nu=0}^{N-k-1} y_\nu y_{\nu+k} \quad / \quad \left(\sum_{\nu=0}^{N-k-1} y_\nu^2 \sum_{\nu=k-1}^{N-1} y_\nu^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (40)$$

It is of the same type as (37) but even more complicated. A detailed investigation shows that (38) does not reproduce exactly any set of frequencies. As a result of the above consideration we must conclude that the iteration (4) cannot be recommended for practical use.

I am indebted to my wife Leonie for carrying out all the numeric computations.

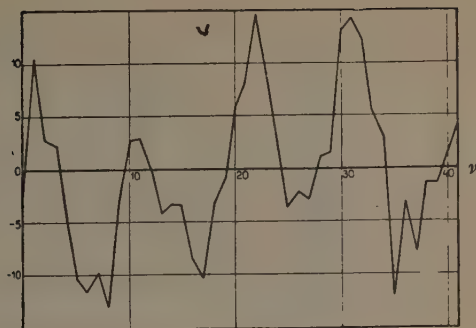


Fig. 1.
 $y_v^{(0)}$, original values.

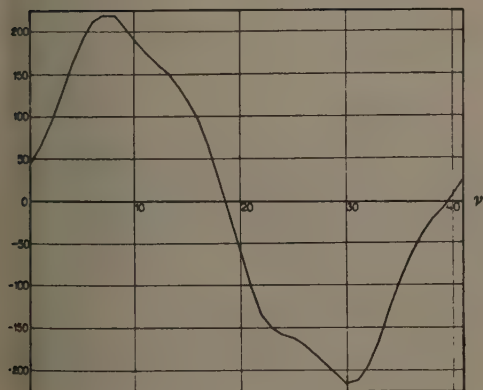


Fig. 2.
 $\eta_v^{(2)}$, first iteration of
 original values.

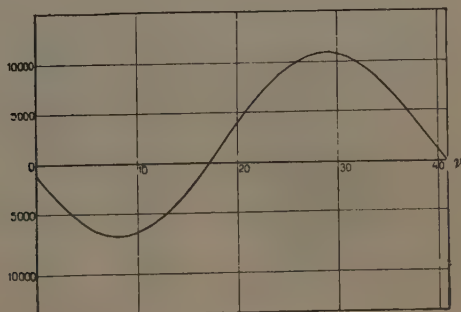


Fig. 3,
 $y_v^{(4)}$, second iteration of
 original values. Shows first
 harmonics.

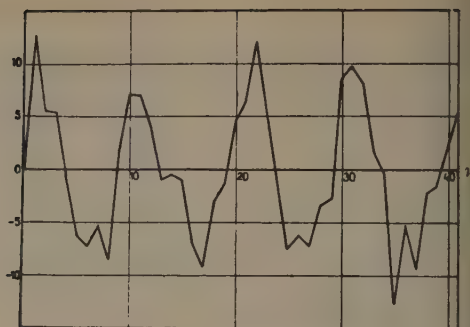


Fig. 4.
 $\zeta_v^{(0)}$, first remainder.

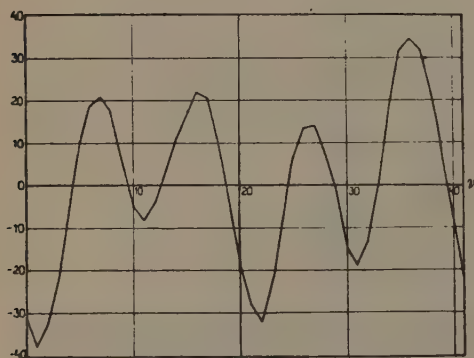


Fig. 5,
 $\zeta_v^{(2)}$, iteration of first
remainder. Shews fourth harmonics.

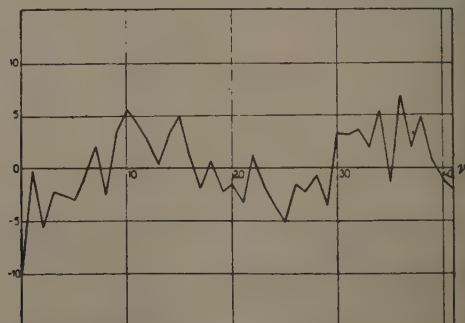


Fig. 6.
 $a_v^{(0)}$, second remainder.

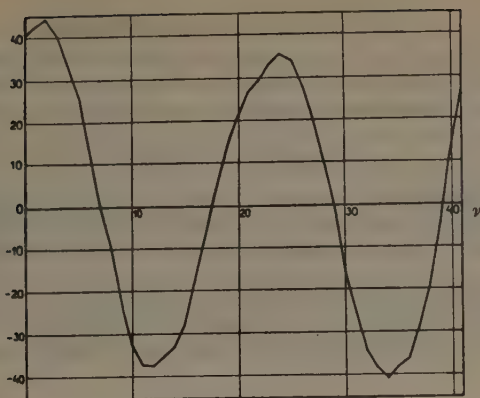


Fig. 7.

$\alpha_p^{(2)}$, iteration of second remainder. Shows second harmonics

REFERENCES

1. L. W. Pollak, Harmonic Analysis Schedules: published by the Stationery Office Dublin 1947.
2. J. Fuhrich, Statistický Obzor, Prague, p. 471. 1933.
L. W. Pollak, und Kaiser, Statistický Obzor, Prague 16, 13. 1935.
3. Galitsin: Compt. Rend. Just. Sism. 1, 1904.
W. Schmidt: Meteorologische Zeitschrift p. 401 1911, p. 392, 1913.
4. Rubinstein: Meteorologische Zeitschrift p. 222 1922

ОТЫСКАНИЕ ПЕРИОДИЧНОСТЕЙ

(Л. Яноши)

(Резюме)

В настоящей статье обсуждается вопрос о скрытой периодичности эмпирического материала. Полный анализ фурье дает всё, что относится к периодичности данного множества измерений. Однако работа необходима для проведения такого анализа, который растет в прямой пропорциональности с квадратом числа наблюдений. Поэтому является желательным выработка метода, позволяющего находить непосредственно важнейшие компоненты фурье. Автор изменяет старый метод Шмидта, доказав, что этот метод очень удобен для определения более важных компонентов. Зато метод предложенный фуррихом, являющийся расширением автокорреляционного метода, должен быть отвергнутым, так как применение его требует больше работы, и дает меньше результатов, чем полный анализ фурье.

PULSE SPECTROGRAPH

By
A. DALLOS

TUNGSRAM RESEARCH LABORATORY, BUDAPEST

(Received : 15. II. 1950.)

A simple apparatus and method was developed for investigating the amplitude-spectrum of a series of random pulses of about 10^{-6} sec. length. The time necessary for measuring amplitude spectrum of appr. 10^6 random pulses is half an hour.

Introduction. Electrons are emitted at random one by one from a cathode of an electron multiplier tube. The number of these electrons is multiplied on the dynodes of the multiplier by a factor which varies statistically around

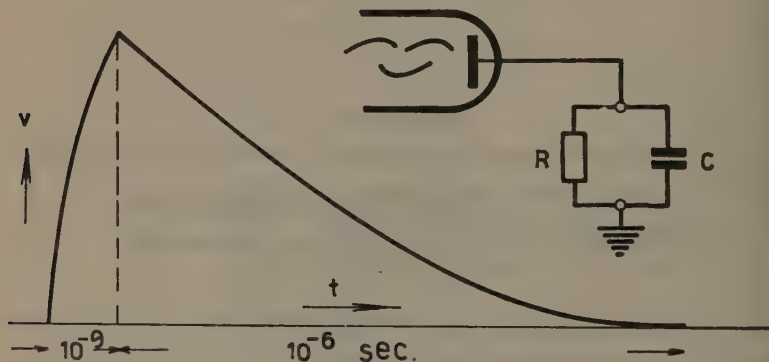


Fig. 1.

The shape of a single pulse.

a most probable value. The pulses produced on the collector plate have rise times of less than 10^{-9} sec [1. 2.] while their decays are shorter than 10^{-6} sec (both branches having exponential character corresponding to the resistance and stray capacitance values of the collector plate system). (Fig. 1.) It was decided to investigate the amplitude spectrum of such multiplier pulses, because the elementary properties of a multiplier can be investigated in this manner.

The registration of the pulses on a moving film and the evaluation (i. e. counting the pulses of different amplitudes one by one) was tiresome

work and the statistical error was too large. So it was found necessary to elaborate a method which is superior in quickness and accuracy to the method mentioned above. The fundamental idea was given by Maeder [3]: the pulses in question are made visible on the screen of the tube. The pulses are to be transformed in such manner, that the amplitude of the transformed pulses should be proportional to that of the original ones, the rising and descending branches should be of short duration, the electron beam should stay on the top for a long and definite time. If these two intervals differ by such an amount, that the ascending and decaying branches remain invisible, while the top is well perceptible, luminous spots at a definite height will be perceptible instead of lines. Maeder has photographed these points and has determined the number of pulses as a function of pulse amplitude by photometric method.

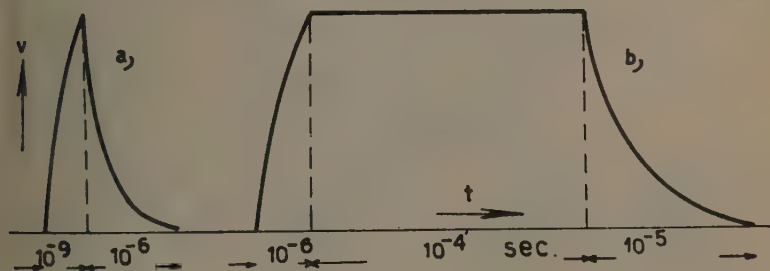


Fig. 2.

a) original pulse b) the artificially lengthened one. (The amplitude of the lengthened pulse is proportional to that of the original one.)

This idea was used here also with the following improvements.

1. A simpler pulse-lengthening device was constructed.

2. Direct photometry was used and it was possible to eliminate the calibration of photographic plates for blackening.

The pulse-lengthening apparatus. The requirement for the pulse-lengthening device is to transform pulses like that in Fig. 2/a. into pulses like that in Fig. 2/b. This was achieved by charging a condenser through a tube. The voltage on the condenser corresponds to the integral of the pulse amplitude; as the pulse is of exponential character, the signal is proportional to its integral. After charging the condenser, the voltage on the condenser remains constant, until it is discharged through a tube. This is accomplished by an electronic switch.

The complete circuit is shown in Fig. 3. The tube II works in cut-off. Current flows through the tube only if a positive pulse appears on its grid.

(As in our case the original pulses are negative, the phase-inverting tube I precedes tube II.) If a pulse reaches the grid of tube II, condenser C_3 is charged to a voltage corresponding to the time integral of the positive pulse. During this time, tube III is closed. Having no signals, such currents flow through the trigger circuit (tube IV and V), as will ensure that the grid and plate of tube III are on the same potential, and therefore condenser C_3 cannot be charged. — But if a positive pulse reaches tube II, a negative pulse reaches

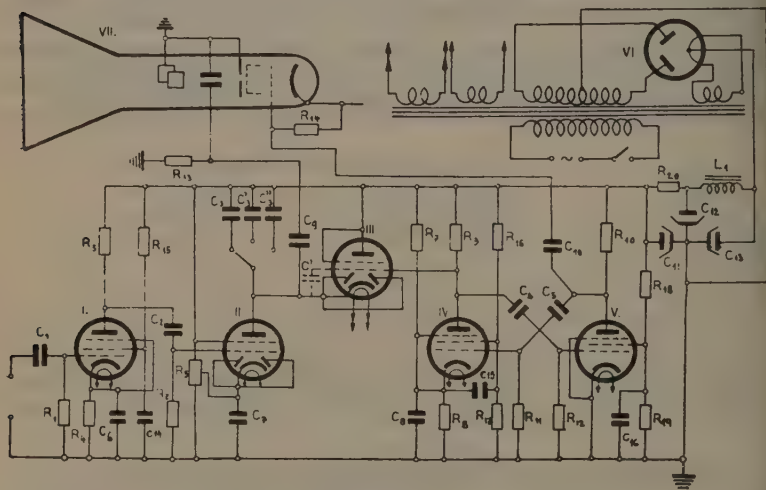


Fig. 3.

The entire device used for pulse lengthening.

Tubes: I = EF6, II = EBL21, III = UBL21, IV = EF6, V = EF6, VI = AZ21, VII = 5BP1/1802, $C_1 = 6000$ pF, $C_2 = 500$ pF, $C_3 = 200$ pF, $C'_3 = 600$ pF, $C''_3 = 2000$ pF, $C_4 = 300$ pF, $C_5 = 300$ pF, $C_6 = 0.01$ μ F, $C_7 = 0.1$ μ F, $C_8 = 0.01$ μ F, $C_9 = 0.1$ μ F, $C_{10} = 1000$ pF, $C_{11} = 32$ μ F, $C_{12} = 16$ μ F, $C_{13} = 16$ μ F, $C_{14} = 0.1$ μ F, $C_{15} = 0.1$ μ F, $C_{16} = 0.1$ μ F, $R_1 = 0.5$ MOhm, $R_2 = 0.5$ mOhm, $R_3 = 50$ KOhm, $R_4 = 500$ Ohm, $R_5 = 30$ KOhm, $R_7 = 10$ KOhm, $R_8 = 500$ Ohm, $R_9 = 80$ KOhm, $R_{10} = 80$ KOhm, $R_{11} = 100$ KOhm, $R_{12} = 100$ KOhm, $R_{13} = 1$ KOhm, $R_{14} = 1$ MOhm, $R_{15} = 100$ KOhm, $R_{16} = 30$ KOhm, $R_{17} = 15$ KOhm, $R_{18} = 30$ KOhm, $R_{19} = 15$ KOhm, $R_{20} = 500$ Ohm, $L_1 = 3$ H.

its plate. This negative pulse closes through condenser C' the tube V and a positive pulse generated on the plate resistance opens tube IV. Now C_3 is charged during the time of a pulse (10^{-6} sec) and its voltage remains unchanged until the trigger circuit reaches the rest position. This lasts in our case 10^{-4} sec. Then tube III loses its negative bias and the condenser is discharged.

Applying the voltage which appears on C_3 to the vertical deflecting plates of the C. R. tube, the fluorescent spot shifts in the vertical direction

in 10^{-6} sec (charging), then remains there 10^{-4} sec. and finally returns within about 10^{-5} sec to its zero position (discharging). The motion within 10^{-6} sec is not visible because of the rapid motion of the spot, the part lasting 10^{-4} sec is well visible. To eliminate the visibility of the part lasting 10^{-5} sec. we apply a negative pulse to the grid of the C. R. tube from the plate of tube V.

The range of pulse voltage can be chosen in our case max. 0,2 V, max. 0,6 V, max. 2 V. The switching of ranges is effected by means of varying the capacity of condenser C_3 .

An error may be caused due to the fact that a certain voltage is required to close tube III (i. e. to prevent discharging of C_3), which takes place comparatively later in case of smaller pulses than in the case of larger ones (Fig. 4.), and therefore a larger area is neglected (as compared

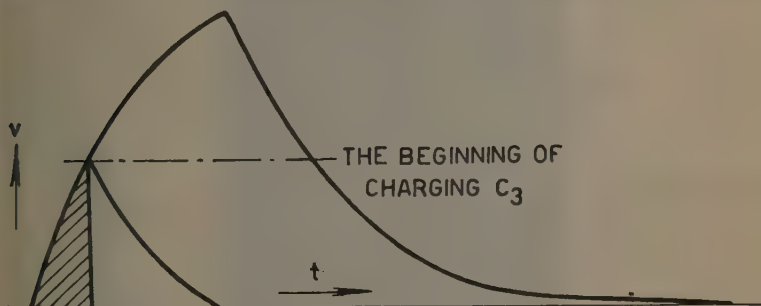


Fig. 4.

The apparatus starts to operate only above a certain voltage. Therefore for smaller pulses relatively greater parts are lost.

with the whole area) in case of smaller pulses than in case of larger ones. As the whole rising branch lasts for 10^{-9} sec, the descending one for 10^{-6} sec, this error can be neglected. Even in the worst case the whole neglected area is less than 0,1 % (this would occur if the charging of the condenser would begin only at the top of the pulse). This supposition was examined during the calibration of the instrument. It was found justified.

In the instrument described above no special care was taken for the case when two pulses arrive within less than 10^{-4} sec. This difficulty can be overcome with additional tubes (Maeder), but it is simpler to reduce the number of pulses.

As the screen of the C. R. tube has an afterglow of 10^{-3} sec, the horizontal plates are supplied with a sweep voltage. If $f=10^4$ cycles/sec. we obtain lines instead of points. Maeder applies the sweep voltage only in the case when a pulse reaches the instrument. This is unnecessary, because it is simpler to work with the own time base of the oscilloscope. Fig. 5. shows a photo made when the sweep is linear and slow.

The complete pulse spectrograph. Applying the pulses produced as described above to the vertical deflecting plates of a C. R. tube, points are to be seen at a height proportional to the pulse amplitudes. In order to know the amplitude distribution, the number of flashes appearing at a given distance from the zero level has to be determined.

Quick method of measurement. An opaque screen with a slit is placed before the screen of the C. R. tube ; before the slit there is a light-sensitive



Fig. 5.

A photography of the C. R. tube with 0,1 sec exposure. Horizontal axis : the time base ; Vertical axis : the nearly square pulses.

multiplier tube. Variation of the zero level (zero line) of the fluorescent spot is achieved by biasing the vertical deflecting plates of the C. R. tube. Then, corresponding to the bias voltage, the flashes which appear in front of the slit represent various but definite pulse amplitudes (Fig. 6.). The photoelectric current of the multiplier may be measured (Dr. Faragó's idea.). The $t = RC$ product defines the averaging properties of the instrument.

If a great number of pulses, e. g. 10^5 pulses/sec, arrives at the multiplier cathode, the entire distribution curve can be displayed. For this purpose the following method is used : The shifting of the spot from its zero position is not accomplished by d. c. biasing, as before, but by means of a saw-tooth voltage (Fig. 7.). The same voltage is supplied to the horizontal deflecting

plates of another C. R. tube. We applied voltage on the load resistance of the second multiplier (being proportional to the number of flashes) after amplification to the vertical deflecting plates of the second C. R. tube. The display on the screen is subjected to statistical fluctuations and becomes steady only if the number of pulses/sec. is high enough. In any case the most probable distribution can be obtained photographically and no special evaluation is required. It should be mentioned that the method described above could

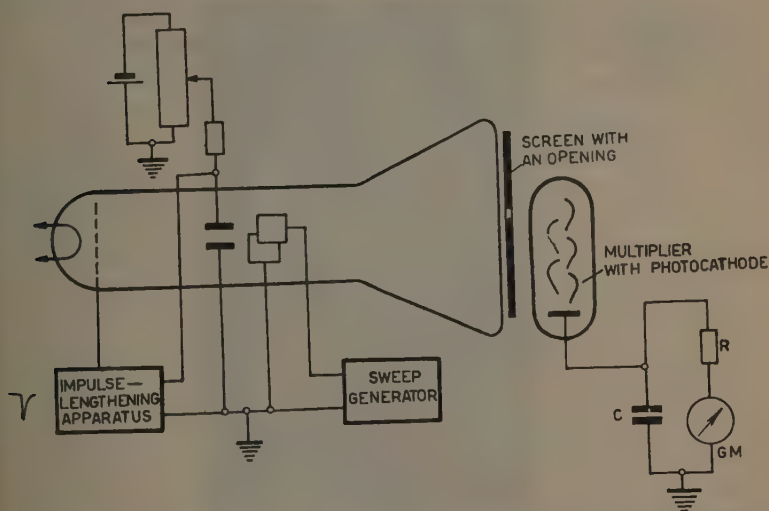


Fig. 6.

The flashes are transformed to electric current by a photomultiplier. Its average intensity is measured by a galvanometer and it is proportional to the number of the equal pulses. The zero level of the spot is altered by a variable direct voltage.

not be used for measurements because the C. R. tube displays obtained showed a large statistical fluctuation. This was due to the resolving power of 10^{-4} sec.

Accurate measurements with low-rate pulses can be achieved by photographing the picture appearing on the screen of the C. R. tube, during a relatively long time. The blackenings caused by the separate flashes at the same place are added, the long exposure time is averaging and so the statistical error is reduced. The evaluation can be carried out photometrically.

For an easy evaluation of the measurement, and for avoiding the separate calibration of photographic plates for blackening (as it was done e. g. by Maeder), the horizontal deflection of the C. R. tube was fed instead of by linear sweeping by a quadratically time-dependent one.

Denoting by x the distance of the spot from its zero position, and the time by t , the deflection should follow the law $x = at^2$ (a is a constant).

Because the brightness of any spot is proportional to the sojourn there of the electron beam, in other words inversely proportional to the sweeping rate, the brightness F of the point x is governed by the following relation:

$$F(x) = \frac{c}{dx/dt} = \frac{c}{2\sqrt{ax}} = \frac{k}{\sqrt{x}} \quad \left(k = \frac{c}{2\sqrt{a}} = \text{const} \right).$$

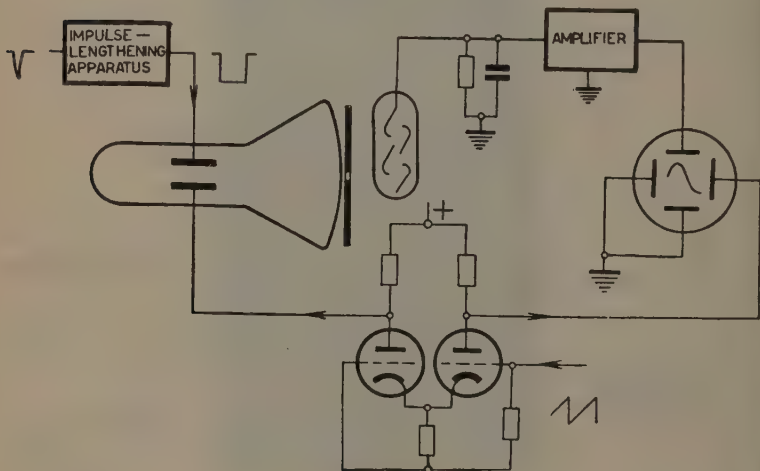


Fig. 7.

Altering the zero level of the spot by applying a sweep voltage and controlling another C. R. tube with a voltage proportional to the photo current, the amplitude spectrum is visible on the screen. (The horizontal deflection of the second tube is produced by the sweep of the first one.)

Photographing the screen of a tube with such a quadratically deflected electron beam, each grain of the photographic emulsion is irradiated by a quantity of light defined by the above equation. The blackening curve may be determined in this manner, because it is accurately known, which brightness has caused the blackening on the place.

The blackening curve has been determined by Maeder in his experiments by the usual time-consuming procedure. Besides these inherent complications other errors may be incurred by the eventual differences in the developing and fixating process, inhomogeneity and non-interchangeability of the plates and the suitable part of the plate characteristic must be maintained.

These possible sources of error can be eliminated at once, when the blackening curve is ascertained by the pulses themselves.

The results of a measurement are shown in Fig. 8. The pulse distribution function can now be easily calculated by the following reasoning: On each straight line $x = a$ the same amount of light is generated by any pulse and the different blackenings are caused therefore by different numbers of pulses as function of their amplitude ξ . On the straight line $\xi = b$, because of the equal number of pulses registered, the different blackenings are caused, however, by the non-equal electron beam velocity. Comparing the blackenings

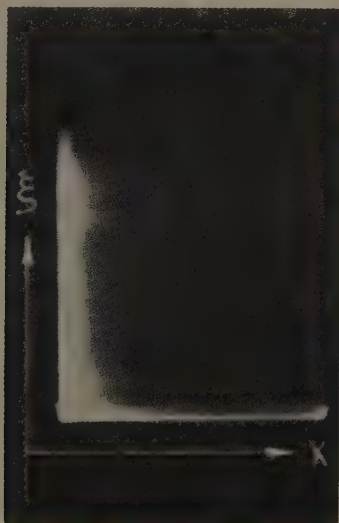


Fig. 8.

10 minutes exposure from C. R. tube. Vertical: the different amplitudes (ξ); Horizontal: the corresponding probabilities, the relative numbers (x), in arbitrary units. (The deflection is produced by the lengthened pulses and by the quadratic sweep.) The contour shows the amplitude spectrum of 10^6 random pulses.

on a line $x = a$ with the blackenings on a line $\xi = b$ and if equal blackenings are found on the places (a, ξ_1) and (x_k, b) then the relative light intensity may be determined by

$$F(x) = \frac{k}{\sqrt{x}}$$

The point under investigation being on the line $x = a$, the brightness is proportional to the number of pulses W_1 , and the distribution function is given by

$$W(\xi_1) = \frac{\sqrt{x_k}}{k}$$

$W(\xi_1) d\xi_1$ denoting the number of pulses with amplitudes between ξ_1 and $\xi_1 + d\xi_1$.

The distribution function $W(\xi)$ itself is recognizable by the above procedure. The brightness of any spot is proportional to the number of pulses $W(\xi)$ and the luminance of any pulse proportional to $F(x)$, i. e. $W(\xi) F(x)$.

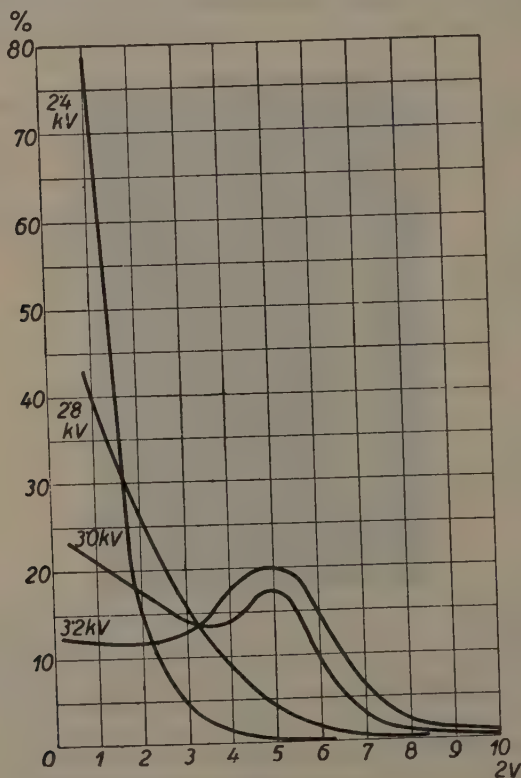


Fig. 9.

The amplitude spectra of a multiplier with 14 dynodes, with thermionic cathodes for different plate voltages.

Considering the points with equal blackenings, these points obey $W(\xi) F(x) = \text{const.}$ and because

$$F(x) = \frac{k}{\sqrt{x}} \quad W(\xi) = \frac{\sqrt{x}}{k}.$$

These points determine the square root of the distribution function. (See in Fig. 8. the boundary of the light place.)

The quadratic time base was obtained from linear sweep by electronic integrating.

It should be noted that by using an exponential time base $x = ae^{bt}$, the velocity $\frac{dx}{dt} = bx$, the light generated $F(x) = \frac{1}{bx}$ and the points with equal blackenings would give the distribution function itself $W(\xi) = bx$.

Results. The distribution curve of a multiplier tube having a thermionic cathode and 14 dynodes was investigated at different plate voltages in the several ways described above ($C \simeq 10 pF$). The results of measurements are shown in Fig. 9. It may be seen, that the amplitude distribution curve depends much upon the voltage; if the voltage increases, the number of pulses of small amplitude decreases. The number of pulses of average amplitude approaches a limit as seen on Fig. 9. The phenomenon is probably caused by space charge effects occurring at higher voltages (i. e. at higher electron densities).

Remarks. The instrument is capable of registering correctly a series of pulses if the integral of the pulse is proportional to its amplitude, and the rise time is not longer than one hundredth of the entire pulse. The quick method is useful when the number of pulses is great, the photographic method is advantageous when the number of pulses/sec. is small.

Acknowledgements. The experimental work described above was performed during the first part of 1948 in the laboratory of the United Incandescent Lamp & Electrical Co. (Tungsrám) Újpest. I wish to express my thanks to Dr. P. Faragó and Dr. J. Póczy for calling my attention to the problem.

REFERENCES

1. C. C. Wang, Phys. Rev. **68**. 284. (1945).
2. G. Papp, Rev. Sci. Instr. **19**. 568. (1948).
3. D. Maeder, Helv. Phys. Acta, **20**. 139. (1947).

ИМПУЛЬСНЫЙ СПЕКТРОГРАФ

(А. Даллош)

(Резюме)

Автор составил прибор для определения функции распределения по величине импульсов являющихся случайными как по отношению времени, так и по отношению амплитуда. С помощью рассматриваемого метода оценимо в короткое время даже и множество импульсов состоящее из 10^6 толчков. Был составлен электронный прибор для квадратуры острых толчков. Вводя так преобразованные импульсы в катодную лампу, станут видными только вершины толчков. Разбираются некоторые методы суммации и оценки. „Электрическое“ оценивание делает возможным быстрое, а фотографическое измерение точное, определение. Сообщается метод, с помощью которого можно избежать затруднительного измерения кривой черчения, функция распределения непосредственно, без измерения, появится на фотографической пластинке. Приводятся некоторые измерения относящиеся к толчкам времени 10^{-6} сек. снабдительного потенциала служившего вторичному электронному усилению.

ZUR LÖSUNG DER THOMAS-FERMI-DIRACSCHEN GLEICHUNG

Von

P. GOMBÁS und R. GÁSPÁR

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST.

(Eingegangen: 25. II. 1950.)

Es werden aus den von Umeda mit den Brillouinschen Randbedingungen berechneten Lösungen der Thomas-Fermi-Diracschen Gleichung die Lösungen dieser Gleichung für die von Jensen eingeführten Randbedingungen durch ein Störungsverfahren berechnet.

Die Grundgleichung des Thomas-Fermi-Diracschen statistischen Atommodells lautet folgendermassen [1]

$$\psi'' = x \left[\left(\frac{\psi}{x} \right)^{\frac{1}{2}} + \beta \right]^3. \quad (1)$$

Hier ist

$$x = \frac{r}{\mu},$$

$$\psi(x) = \frac{r}{Ze} (V - V_0 + \tau^2),$$

$$\beta = \tau \left(\frac{\mu}{Ze} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\mu = \frac{1}{4} \left(\frac{9\pi^2}{2Z} \right)^{\frac{1}{3}} a_0, \quad V_0 = \frac{(Z-N)e}{r_0} + \frac{15}{16} \tau^2, \quad \tau = \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{e}{a_0} \right)^{\frac{1}{2}}$$

und es bedeutet ψ'' die zweite Ableitung von ψ nach x , r die Entfernung vom Kern, V das Gesamtpotential des Atoms, Z die Ordnungszahl des Atoms, N die Anzahl der Elektronen im Atom, r_0 den Grenzradius des Atoms, e die positive Elementarladung und a_0 den kleinsten Bohrschen Wasserstoffradius. Die Gleichung (1) ist mit den folgenden Randbedingungen zu lösen [2]

$$\psi(0) = 1, \quad (2)$$

$$\psi(x_0) = \frac{\beta^2}{16} x_0, \quad (3)$$

$$\psi'(x_0) x_0 - \psi(x_0) = -\frac{Z-N}{Z}, \quad (4)$$

wo x_0 dem Rand des Atoms entspricht, d. h. es ist

$$x_0 = \frac{r_0}{\mu}.$$

Für neutrale Atome ($N=Z$) ist die rechte Seite von (4) gleich 0.

Die Gleichung (1) wurde von Umeda [3] für die 92 neutralen Atome von Wasserstoff bis Uran gelöst und zwar mit den folgenden Randbedingungen

$$\psi(0) = 1, \quad (5)$$

$$\psi(x_0) = 0, \quad (6)$$

$$\psi'(x_0) = 0. \quad (7)$$

Zwei dieser Randbedingungen unterscheiden sich von den weiter oben angegebenen. Die von Umeda benutzten Randbedingungen (5)–(7) stammen von Brillouin [4] und entsprechen der physikalischen Forderung, dass ein *hervorgehobenes* Elektron des statistischen Atoms die kleinstmögliche Energie besitze. Diese Forderung führt jedoch zu einem Atommodell mit einer Randdichte

$\varrho_0 = 0,001089 \frac{1}{a_0^3}$ das nicht stabil ist, denn erstens würden schon bei einer Elek-

tronendichte von $\varrho = 0,001475 \frac{1}{a_0^3}$ die Elektronenspinne der Elektronen mit antiparallelem Spin umklappen,¹ was bei Brillouin unberücksichtigt blieb, und zweitens verschwindet der Nullpunktsdruck des Elektronengases am Atomrand nicht.

Zu einem physikalisch gut begründeten und stabilen Atommodell gelangt man nur mit den Randbedingungen (2)–(4), die von Jensen [2] stammen und der physikalischen Forderung entsprechen, dass die Energie des gesamten Atoms (und nicht nur des jeweils hervorgehobenen Elektrons) ein Minimum sei.

Diese Randbedingungen führen zu einer Randdichte von $\varrho_0 = 0,002127 \frac{1}{a_0^3}$, und es treten hier die im Zusammenhang mit den Brillouinschen Randbedingungen erwähnten Schwierigkeiten nicht auf. Mit diesen Randbedingungen wurden von Jensen, Meyer-Gossler u. Rohde [5] Lösungen für Ar, Kr und X auf numerischem Wege berechnet.

Wir wollen nun zeigen, dass man aus den Umedaschen Lösungen sehr einfach die Lösungen der Gleichung (1) mit den Jensenschen Randbedingungen (2)–(4) für neutrale freie Atome und Ionen sowie für kugelsymmetrisch komprimierte Atome berechnen kann. Hierzu ist zunächst zu bemerken, dass am Rand des Brillouinschen Atoms ein negativer Druck herrscht, der zu einer Kontraktion des Atoms führt, und es ist leicht zu zeigen, dass darum der Jensensche Grenzradius kleiner sein muss als der von Umeda mit den Brillouinschen Randbedingung berechnete. Weiterhin kann man leicht einsehen, dass sich die Lösungen der Gleichung (1) mit den Randbedingungen (2)–(4) von den Umedaschen Lösungen nur sehr wenig und zwar naturgemäss nur in den

¹ Man vgl. hierzu Geiger-Scheels Handb. d. Phys. XXIV/2, 2. Aufl., Springer, Berlin, 1933, Artikel von A. Sommerfeld und H. Bethe S. 485.

Randgebieten unterscheiden werden; dies wird auch durch die von Jensen, Meyer-Gossler und Rohde für Ar, Kr und X auf numerischem Wege direkt berechneten Lösungen bestätigt.

Zur Berechnung der Lösung der Gleichung (1) mit den Randbedingungen (2)–(4) kann man nun so vorgehen, dass man

$$\psi(x) = \psi_u(x) + k\varepsilon(x) \quad (8)$$

setzt, wo $\psi_u(x)$ die Umedasche Lösung und $k\varepsilon(x)$ ein im Verhältnis zu $\psi_u(x)$ kleines Korrektionsglied bezeichnet, k ist eine Konstante. Nach Einsetzen in Gleichung (1) und Entwicklung nach $k\varepsilon(x)$ ergibt sich bei Vernachlässigung der Glieder, die von zweiter und höherer Ordnung klein sind

$$\psi_u'' + k\varepsilon'' = x \left[\left(\frac{\psi_u}{x} \right)^{\frac{1}{2}} + \beta \right]^3 + \frac{3}{2} \left[\left(\frac{\psi_u}{x} \right)^{\frac{1}{4}} + \beta \left(\frac{x}{\psi_u} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 k\varepsilon.$$

Mit Rücksicht darauf, dass ψ_u eine Lösung von (1) ist, findet man für ε die homogene Differentialgleichung

$$\varepsilon'' = \frac{3}{2} \left[\left(\frac{\psi_u}{x} \right)^{\frac{1}{4}} + \beta \left(\frac{x}{\psi_u} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \varepsilon. \quad (9)$$

Da ψ_u der Randbedingung (5) genügt, muss ε der Randbedingung

$$\varepsilon(0) = 0 \quad (10)$$

genügen. Weiterhin fordern wir

$$\varepsilon'(0) = 1. \quad (11)$$

Durch die letzte Bedingung wird der Anstieg der Anfangstangente

$$\psi'(0) = \psi_u'(0) + k. \quad (12)$$

Die Bestimmung von k und x_0 geschieht aus den Randbedingungen (3) und (4).

Die Gleichung (9) wurde für das neutrale Ne-, Ar-, Kr-, X- und Rd-Atom gelöst. Die Lösungen sind in der Tabelle 1 dargestellt. Als unabhängige Variable

wurde hierbei die von Umeda¹ benutzte Variable $\bar{x} = \frac{x}{\psi_0^{\frac{1}{3}}}$ benutzt, wo

$\psi_0^{\frac{1}{3}}$ eine Konstante bezeichnet, bezüglich der wir auf die zitierte Arbeit von Umeda verweisen und deren Zahlenwerte für die hier behandelten Lösungen wir in Tabelle 1 angeben.

In Tabelle 2 bringen wir die nach (8) berechneten Lösungen als Funktion von \bar{x} sowie die Werte von Z , μ , β und x_0 .

¹ K. Umeda, l. c. Die von Umeda und hier in den Tabellen benutzten transformierten Größen sind

für das Argument $\bar{x} = x \psi_0^{-\frac{1}{3}}$, für die Funktion $\psi = \psi \psi_0$, für die Funktion $\bar{\varepsilon} = \varepsilon \psi_0$,

für die Ableitung $\bar{\psi}' = \psi' \psi_0^{\frac{4}{3}}$ u. s. w.

Mit Hilfe der Funktionen ψ_u und ε kann man auch die Lösungen der Thomas-Fermi-Diracschen Gleichung für positive Ionen und durch äusseren Druck kugelsymmetrisch zusammengedrückte Atome berechnen. Aus den Randbedingungen (3) und (4) für positive Ionen ergeben sich mit dem Ansatz (8) sofort die Werte der Parameter k und der Grenzradien x_0 . In der Tabelle 3 geben wir die zusammengehörenden Werte von k und x_0 für das neutrale Ne-, Ar-, Kr-, X- und Rd- Atom und die Ionen Ne^+ , Ne^{++} , Ar^+ , Ar^{++} usw. an.

In Tabelle 4 bringen wir zum Vergleich die von Jensen, Meyer-Gossler und Rohde für Ne, Ar und X und der Ionen dieser Atome direkt berechneten Werte von x_0 . Wie zu sehen ist, stimmen die unseren mit diesen sehr gut überein.

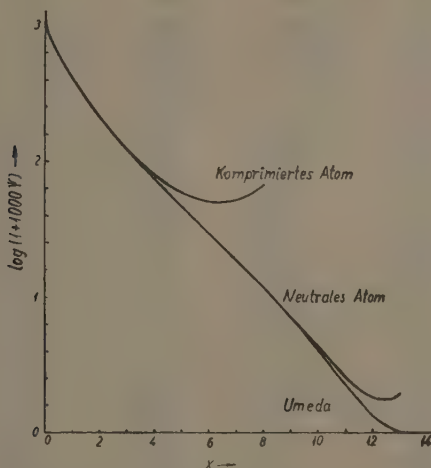


Fig. 1.

Lösungen der Thomas-Fermi-Diracschen Gleichung für das Ar-Atom

Schliesslich bringen wir in Figur 1 noch für Ar die von Umeda mit den Brillouinschen Randbedingungen bestimmte Lösung und die von uns hier bestimmte Lösung. Die von Jensen, Meyer-Gossler und Rohde berechnete Lösung fällt innerhalb der Zeichengenauigkeit mit der von uns berechneten zusammen. Aus der Figur ist zu ersehen, dass die Korrekursionsgrösse $k\varepsilon(x)$, d. h. die Differenz der von uns berechneten Lösung und der Umedaschen Lösung mit Ausnahme der Randgebiete überall äusserst klein ist. In Figur 1 bringen wir ausserdem noch die Lösung der Thomas-Fermi-Diracschen Gleichung für ein kugelsymmetrisch komprimiertes Ar-Atom. Wir berechneten unsere Lösung so, dass das komprimierte Ar-Atom das gleiche Volumen habe wie das von Jensen, Meyer-Gossler und Rohde bestimmte. Die von uns berechnete

Lösung stimmt mit der von Jensen, Meyer-Gossler und Rohde berechneten wieder innerhalb der Zeichengenauigkeit überein.

Die Berechnungen, die wir hier für Ne, Ar, Kr, X und Rd durchgeführt haben, lassen sich sehr einfach auf weitere Atome übertragen. Man kann auch so vorgehen, dass man die Funktion ε aus den hier berechneten durch Interpolation bestimmt.

Tabelle 1.
DIE FUNKTION $\bar{\varepsilon}(\bar{x})$ UND DER PARAMETER $\bar{\psi}_0^{\frac{1}{3}}$.

$\frac{Z}{\bar{\psi}_0^{\frac{1}{3}}}$	Ne 10 0,8221	Ar 18 1,0000	Kr 36 1,260	X 54 1,442	Rd 86 1,684
\bar{x}	$\varepsilon(x)$	$\varepsilon(x)$	$\varepsilon(x)$	$\varepsilon(x)$	$\varepsilon(x)$
0,0	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
0,1	0,1009	0,1011	0,1014	0,1019	0,1024
0,2	0,2047	0,2062	0,2078	0,2104	0,2129
0,3	0,3132	0,3174	0,3232	0,3293	0,3363
0,4	0,4275	0,4362	0,4490	0,4607	0,4755
0,5	0,5484	0,5637	0,5866	0,6070	0,6329
0,6	0,6767	0,7009	0,7376	0,7696	0,8110
0,7	0,8132	0,8488	0,9034	0,9502	1,0118
0,8	0,9584	1,0083	1,0853	1,1506	1,2377
0,9	1,1131	1,1803	1,2846	1,3724	1,4909
1,0	1,2779	1,3656	1,5027	1,6174	1,7737
1,2	1,6403	1,7797	2,000	2,184	2,438
1,4	2,051	2,258	2,590	2,865	3,252
1,6	2,515	2,808	3,282	3,677	4,236
1,8	3,038	3,438	4,091	4,636	5,415
2,0	3,626	4,156	5,029	5,759	6,814
2,2	4,286	4,971	6,111	7,067	8,461
2,4	5,023	5,893	7,351	8,581	10,386
2,6	5,844	6,931	8,767	10,322	12,621
2,8	6,758	8,097	10,377	12,314	15,200
3,0	7,773	9,402	12,198	14,584	18,161
3,2	8,896	10,859	14,251	17,160	21,54
3,4	10,137	12,480	16,558	20,07	25,39
3,6	11,505	14,280	19,142	23,35	29,75
3,8	13,011	16,275	22,03	27,02	34,66
4,0	14,666	18,479	25,24	31,14	40,19
4,2	16,481	20,91	28,81	35,73	46,39
4,4	18,470	23,59	32,77	40,84	53,31
4,6	20,65	26,53	37,15	46,51	61,04
4,8	23,03	29,77	41,99	52,80	69,63
5,0	25,63	33,31	47,31	59,75	79,17
5,2	28,46	37,19	53,18	67,42	89,73
5,4	31,55	41,43	59,62	75,87	101,41

	Ne	Ar	Kr	X	Rd
\bar{x}	$\bar{\varepsilon}(\bar{x})$	$\bar{\varepsilon}(\bar{x})$	$\bar{\varepsilon}(\bar{x})$	$\bar{\varepsilon}(\bar{x})$	$\bar{\varepsilon}(\bar{x})$
5,6	34,92	46,06	66,68	85,16	114,29
5,8	38,58	51,12	74,42	95,37	128,48
6,0	42,56	56,64	82,89	106,56	144,08
6,2	46,88	62,64	92,14	118,82	161,22
6,4	51,59	69,18	102,25	132,23	180,00
6,6	56,69	76,30	113,27	146,88	200,6
6,8	62,24	84,04	125,28	162,88	223,1
7,0	68,26	92,45	138,37	180,34	247,7
7,2	74,80	101,59	152,62	199,37	274,6
7,4	81,90	111,52	168,12	220,1	303,9
7,6	89,60	122,31	184,98	242,6	335,8
7,8	97,98	134,02	203,3	267,2	370,6
8,0	107,08	146,74	223,2	293,9	408,4
8,2	116,97	160,56	244,8	322,9	449,6
8,4	127,73	175,57	268,3	354,4	494,4
8,6	139,45	191,88	293,8	388,6	543,1
8,8	166,14	209,6	321,6	425,8	596,0
9,0	166,13	228,9	351,7	466,3	653,5
9,2	181,34	249,9	384,5	510,1	715,9
9,4	197,98	272,7	420,1	557,8	783,8
9,6	216,2	297,6	458,8	609,7	857,5
9,8	236,2	324,8	500,9	666,0	937,5
10,0	258,2	354,5	546,8	727,3	1024,6
10,2	282,5	387,1	596,8	794,0	1119,2
10,4	309,4	422,9	651,3	866,5	1222,1
10,6	339,3	462,1	710,8	945,7	1334,1
10,8	372,6	505,4	776,0	1032,0	1456,1
11,0	410,0	553,2	847,4	1126,4	1589,0
11,2	452,3	606,3	925,7	1229,6	1734,1
11,4	500,5	665,4	1011,0	1342,8	1892,6
11,6	556,0	731,5	1107,1	1467,0	2066
11,8	620,8	806,1	1212,4	1603,8	2256
12,0	698,1	890,6	1329,4	1754,8	2465
12,2	793,1	987,5	1459,9	1921,9	2694
12,4	916,3	1100,0	1606,3	2108	2948
12,6		1232,7	1771,6	2315	3228
12,8		1393,3	1959,7	2547	3540
13,0		1595,9	2176	2810	3888
13,2			2429	3109	4278
13,4			2729	3454	4718
13,6			3097	3856	5220
13,8				4334	5798
14,0				4922	6471
14,2				5576	7272
14,4				6571	8256
14,6					9520
14,8					11335

Tabelle 2.

DIE FUNKTION $\psi(\bar{x})$ WEITERHIN DIE WERTE VON μ , β UND \bar{x}_0 .

Z μ β \bar{x}_0	Ne 10 0,3380 0,04563 11,9	Ar 18 0,4109 0,03084 12,5	Kr 36 0,2681 0,01943 13,2	X 54 0,2342 0,01482 13,7	Rd 86 0,2010 0,01087 14,1
x	$\psi(x)$	$\bar{\psi}(\bar{x})$	$\bar{\psi}(\bar{x})$	$\psi(x)$	$\bar{\psi}(\bar{x})$
0,0	0,5556	1,0000	2,000	3,000	4,778
0,1	0,4969	0,8774	1,707	2,511	3,901
0,2	0,4513	0,7850	1,495	2,169	3,309
0,3	0,4194	0,7094	1,327	1,903	2,860
0,4	0,3801	0,6455	1,189	1,687	2,503
0,5	0,3513	0,5905	1,073	1,508	2,211
0,6	0,3257	0,5425	0,9732	1,357	1,969
0,7	0,3029	0,5003	0,8871	1,228	1,765
0,8	0,2824	0,4627	0,8118	1,116	1,590
0,9	0,2638	0,4292	0,7455	1,018	1,440
1,0	0,2469	0,3990	0,6868	0,9323	1,309
1,2	0,2174	0,3470	0,5874	0,7889	1,093
1,4	0,1924	0,3039	0,5070	0,6746	0,9240
1,6	0,1712	0,2677	0,4448	0,5817	0,7888
1,8	0,1528	0,2370	0,3858	0,5052	0,6790
2,0	0,1369	0,2107	0,3394	0,4416	0,5887
2,2	0,1230	0,1880	0,3000	0,3880	0,5135
2,4	0,1108	0,1682	0,2663	0,3425	0,4504
2,6	0,09997	0,1510	0,2372	0,3036	0,3969
2,8	0,09041	0,1359	0,2119	0,2701	0,3512
3,0	0,08187	0,1225	0,1899	0,2411	0,3119
3,2	0,07425	0,1107	0,1706	0,2158	0,2780
3,4	0,06741	0,1001	0,1536	0,1936	0,2484
3,6	0,06126	0,09075	0,1386	0,1742	0,2226
3,8	0,05572	0,08233	0,1252	0,1570	0,2000
4,0	0,05070	0,07477	0,1133	0,1417	0,1800
4,2	0,04618	0,06797	0,1027	0,1282	0,1624
4,4	0,04206	0,06183	0,09321	0,1161	0,1467
4,6	0,03831	0,05628	0,08466	0,1052	0,1327
4,8	0,03491	0,05125	0,07696	0,09554	0,1202
5,0	0,03180	0,04669	0,07001	0,08681	0,1091
5,2	0,02897	0,04254	0,06372	0,07893	0,09904
5,4	0,02638	0,03876	0,05802	0,07182	0,09001
5,6	0,02400	0,03531	0,05286	0,06538	0,08186
5,8	0,02184	0,03217	0,04816	0,05954	0,07449
6,0	0,01985	0,02929	0,04389	0,05426	0,06783
6,2	0,01803	0,02666	0,03999	0,04944	0,06179
6,4	0,01636	0,02425	0,03644	0,04505	0,05629
6,6	0,01482	0,02206	0,03318	0,04104	0,05129
6,8	0,01342	0,02003	0,03021	0,03740	0,04674

	Ne	Ar	Kr	X	Rd
x	$\psi(\bar{x})$	$\bar{\psi}(x)$	$\psi(\bar{x})$	$\psi(\bar{x})$	$\bar{\psi}(x)$
7,0	0,01213	0,01819	0,02749	0,03406	0,04259
7,2	0,01095	0,01648	0,02501	0,03101	0,03881
7,4	0,009863	0,01493	0,02272	0,02821	0,03534
7,6	0,008869	0,01349	0,02064	0,02566	0,03217
7,8	0,007958	0,01219	0,01871	0,02331	0,02928
8,0	0,007124	0,01098	0,01696	0,02117	0,02662
8,2	0,006362	0,009880	0,01534	0,01919	0,02418
8,4	0,005667	0,008871	0,01387	0,01739	0,02196
8,6	0,005033	0,007946	0,01250	0,01573	0,01991
8,8	0,004456	0,007101	0,01126	0,01421	0,01804
9,0	0,003892	0,006329	0,01013	0,01282	0,01632
9,2	0,003459	0,005625	0,009080	0,01154	0,01474
9,4	0,003032	0,004983	0,008124	0,01037	0,01330
9,6	0,002649	0,004401	0,007251	0,009301	0,01198
9,8	0,002307	0,003874	0,006455	0,008320	0,01075
10,0	0,002004	0,003397	0,005729	0,007425	0,009645
10,2	0,001737	0,002969	0,005068	0,006608	0,008629
10,4	0,001504	0,002586	0,004470	0,005863	0,007699
10,6	0,001304	0,002244	0,003928	0,005187	0,006852
10,8	0,001137	0,001943	0,003440	0,004573	0,006081
11,0	0,0009981	0,001678	0,003001	0,004019	0,005379
11,2	0,0008893	0,001449	0,002610	0,003519	0,004742
11,4	0,0008104	0,001255	0,002261	0,003070	0,004166
11,6	0,0007587	0,001092	0,001954	0,002669	0,003648
11,8	0,0007368	0,0009606	0,001687	0,002314	0,003183
12,0	0,0007460	0,0008597	0,001457	0,002002	0,002767
12,2	0,0007909	0,0007885	0,001262	0,001729	0,002398
12,4	0,0008785	0,0007475	0,001101	0,001495	0,002074
12,6	—	0,0007375	0,0009725	0,001297	0,001791
12,8	—	0,0007612	0,0008760	0,001134	0,001547
13,0	—	0,0008244	0,0008110	0,001004	0,001341
13,2	—	0,0009422	0,0007781	0,0009081	0,001171
13,4	—	—	0,0007788	0,0008447	0,001036
13,6	—	—	0,0008164	0,0008143	0,0009352
13,8	—	—	—	0,0008190	0,0008679
14,0	—	—	—	0,0008625	0,0008347
14,2	—	—	—	0,0009366	0,0008372
14,4	—	—	—	0,001085	0,0008796
14,6	—	—	—	—	0,0009702
14,8	—	—	—	—	0,001135

Tabelle 3.

DIE WERTE VON k UND x_0 FÜR DIE ATOME Ne, Ar, Kr, X UND Rd UND DER EINFACHEN SOWIE ZWEIFACHEN IONEN DIESER ATOME.

	Ne	Ar	Kr	X	Rd
x_0	9,8	12,5	16,6	19,8	23,8
$k \cdot 10^7$	9,44	4,92	2,47	1,65	1,00
	Ne ⁺	Ar ⁺	Kr ⁺	X ⁺	Rd ⁺
x_0	6,58	9,05	12,69	15,30	18,81
$k \cdot 10^8$	61,2	30,4	8,48	4,31	2,34
	Ne ⁺⁺	Ar ⁺⁺	Kr ⁺⁺	X ⁺⁺	Rd ⁺⁺
x_0	4,93	7,25	10,58	12,94	16,17
$k \cdot 10^5$	45,7	14,8	4,96	2,60	1,62

Tabelle 4.

RESULTATE VON JENSEN, MEYER-GOSSLER UND ROHDE.

	Ar	Kr	X
x_0	12,70	16,80	20,10
	Ar ⁺	Kr ⁺	X ⁺
x_0	9,05	12,75	15,35
	Ar ⁺⁺	Kr ⁺⁺	X ⁺⁺
x_0	7,30	10,60	12,90

LITERATUR

1. P. A. M. Dirac, Proc. Cambridge Phil. Soc. **26**, 376, 1930.
H. Jensen, ZS. f. Phys. **89**, 713, 1934;
P. Gombás, Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer
Wien, 1949.
2. H. Jensen, ZS. f. Phys. **93**, 232, 1935.
3. K. Umeda, Journ. of the Fac. of Science. Hokkaido Univ. (2), **III**, 171, 1942.
4. L. Brillouin, Journ. de Phys. et le Radium. **5**, 185, 1934.
5. H. Jensen, G. Meyer-Gossler u. H. Rohde, ZS. f. Phys. **110**, 277, 1938.

К РЕШЕНИЮ УРАВНЕНИЯ ТОМАС—ФЕРМИ—ДИРАКА

(П. Гомбаш и Р. Гашпар)

(Резюме)

Уравнение Томас—Ферми—Дирака, которое Умеда решил при предельных условиях Бриллюэна, решается, исходя из эго решений, с помощью метода возмущений, при предельных условиях Ензена. Полученные решения находящиеся в очень хорошем согласии с некоторыми, непосредственно вычисленными решениями Ензена, Мейер-Госслера и Рода.

ÜBER DIE MÖGLICHKEIT EINER ABÄNDERUNG UND WEITERENTWICKLUNG DES EÖTVÖS'SCHEN VERSUCHES DER GEDREHTEN WAAGE

Von
P. SELÉNYI

INSTITUT FÜR EXPERIMENTALPHYSIK DER UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen: 21. III. 1950.)

Verfasser schlägt vor, bei dem bekannten *Eötvös*'schen Versuch die gleichmässige Drehung der Waage mit einer hin- und herpendelnden Bewegung zu ersetzen, d. h. die Waage, oder vorteilhafter nur den Balken allein, gemäss Abb. 1. auf einem Torsionsdraht aufzuhängen. Wird der Balken in der Nord-Süd Richtung eingestellt, so werden — Resonanz vorausgesetzt — nicht nur durch die Torsionsschwingungen die Balkenschwingungen erregt (*Eötvös*-Effekt), sondern auch umgekehrt, und der aufgehängte Waagebalken, aufgestellt am Aequator (s. Abb. 2.), benimmt sich genau so, wie ein Foucault'sches Pendel am Erdpol. Wird als Null-Lage die Ost-West Richtung gewählt, so darf keine Wirkung der Coriolis'schen Kräfte sich zeigen. Ein solcher Gegenversuch ist weder mit dem Foucault'schen Pendel, noch mit der Anordnung von *Eötvös* möglich.

1. Es ist wohl allgemein bekannt, in welcher Weise *Eötvös* in seiner letzten Arbeit [1. 2.] experimentell die Schwereänderung nachwies, die ein auf der Erdoberfläche in östlicher oder westlicher Richtung bewegter Körper infolge dieser Bewegung erleidet.

Er liess einen an beiden Enden belasteten Waagebalken um eine dem Schwerpunkt nahe gelegte lotrechte Achse rotieren. Die beiden Massen bewegen sich dabei abwechselnd in östlicher und westlicher Richtung; die von der Erdrotation herrührende Zentrifugalkraft nimmt dabei zu und ab, und die hierdurch bewirkten periodischen Schwereänderungen bringen den Waagebalken in Schwingung. — Wird die Umdrehungszeit gleich der Schwingungsdauer der Waage gewählt, so werden die Schwingungen des Waagebalkens durch Resonanz verstärkt und erreichen einen Endwert der Amplitude, der gross genug ist, um sowohl unmittelbar leicht beobachtet wie durch Spiegel und Lichtzeiger auch einer grösseren Hörerschaft vorgeführt zu werden.

Eötvös selbst wurde durch Krankheit und Tod verhindert am Weiterführen seiner Arbeit. Wohl fand diese in der Fachliteratur bald Eingang [3. 4.], von einer Wiederholung oder weiteren Ausgestaltung derselben ist jedoch nichts bekannt geworden.

Im folgenden versuchen wir zu zeigen, wie man dieses klassische Experiment von *Eötvös* abändern und auch inhaltlich weiterentwickeln kann.

2. Wir denken den Waagebalken mittels des Lagers der Mittelschneide auf einen Torsionsdraht aufgehängt, oder noch vorteilhafter, zwischen zwei

ausgespannten Drähten befestigt, wie dies auf der schematischen Abb. 1. dargestellt ist, so, dass der Balken um die Drahtachse, in einer horizontalen Ebene Torsionsschwingungen ausführen kann.

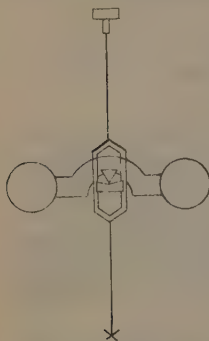


Abb. 1.
Der aufgehängte
Waagebalken

Eine solche horizontale hin- und herpendelnde Bewegung des Waagebalkens kann selbstverständlich auch so verwirklicht werden, dass man die Anordnung von *Eötvös* beibehaltend, dem ganzen Drehgestell samt der Waage eine solche Bewegung erteilt. Praktisch lässt sich dies sogar leichter verwirklichen als die Torsionsaufhängung des Balkens, man verliert aber dabei die Möglichkeit, die im Punkte 6. behandelten Erscheinungen beobachten zu können.

Durch entsprechende Wahl des Drahtes sorgen wir dafür, dass die Dauer der Torsionsschwingungen mit der des Waagebalkens übereinstimme, und wir führen mit dieser Anordnung folgende Versuche aus:

a) Wir stellen die Ruhelage des Waagebalkens in die Meridianebene ein. Bringen wir ihn nun — z. B. durch Hin- und Zurückdrehen des Torsionskopfes — in Horizontalschwingungen von genügender, etwa von 45° Amplitude, so spielt sich hier der gleiche Vorgang ab, wie bei dem Versuch von *Eötvös*: die an den Balkenenden befestigten Massen bewegen sich abwechselnd in östlicher und westlicher Richtung, und die hierdurch verursachten periodischen Schwereänderungen bringen den Balken in Schwingungen um die Schneide.

b) Wir versetzen die Ruhelage des Balkens durch Verdrehung des Torsionskopfes um 90° , in die Richtung Ost—West. Wird jetzt die Verrichtung in Torsionsschwingungen gebracht, so dürfen die (vertikalen) Balkenschwingungen nicht zustande kommen, da ja die Massenpunkte des Balkens sich jetzt — im grossen und ganzen — in südlicher und nördlicher Richtung bewegen, und dadurch keine Schwereänderung in obigem Sinne hervorgerufen wird.

Dieser zweite Versuch kann somit zur Kontrolle des ersten dienen; nämlich zur Entscheidung dessen, ob der beobachtete Effekt: die Anfachung der Balkenschwingungen durch die Torsionsschwingungen, tatsächlich von den, in obigem Sinne definierten Schwereänderungen verursacht wird.

3. Wir wollen diese rein qualitativen Überlegungen noch mit einer quantitativen Beschreibung der zu erwartenden Erscheinungen ergänzen, wobei wir uns unmittelbar den Ausführungen von *Eötvös* anschliessen und des Zusammenhanges wegen auch die Theorie seines Versuches in möglichst kurzer und vereinfachter Form wiederholen.

Wird das Koordinatensystem so gewählt, dass die Achsen X, Y, Z, der Reihe nach mit den Himmelsrichtungen Nord, Ost und lotrecht nach unten

zusammenfallen, dann beträgt die Änderung der Schwerebeschleunigung, die ein nach Osten oder nach Westen bewegter Körper infolge der Änderung der Zentrifugalkraft erleidet

$$\Delta g = -2\Omega \cos \varphi \frac{dy}{dt} \quad (1)$$

wo $\Omega = \frac{2\pi}{86164} = 0,000073$ die Drehungsgeschwindigkeit der Erde und φ die geographische Breite des Beobachtungsortes bedeutet.

Einfachheitshalber bestehe unser Waagebalken aus einem gewichtlosen Stab von $2l$ Länge und die an beiden Enden angebrachten Massen $m_1 = m_2 = m$ sollen als Massenpunkte betrachtet werden. Der Schwerpunkt des Ganzen liege um die Strecke s unterhalb der Schneide, dann ist die (doppelte) Schwingungsdauer des (dämpfungsfreien) Balkens gleich

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{2ml^2}{2mgs}} = 2\pi \sqrt{\frac{l^2}{gs}} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (2)$$

wobei ω die Kreisfrequenz der Schwingungen bezeichnet.

Wird diese Vorrichtung um eine vertikale Achse mit der Winkelgeschwindigkeit ω' gedreht und bezeichnet $\alpha = \omega't$ den Winkel, den der Balken mit der X-Achse einschliesst, so ist für die beiden Massenpunkte:

$$y_1 = l \sin \omega't, \quad \frac{dy_1}{dt} = \omega'l \cos \omega't \quad (3)$$

$$y_2 = l \sin (\omega't + \pi), \quad \frac{dy_2}{dt} = -\omega'l \cos \omega't$$

also das auf den Balken wirkende periodische Drehungsmoment

$$F = (4ml^2\Omega\omega' \cos \varphi) \cos \omega't = A \cos \omega't \quad (4)$$

Wird jetzt $\omega' = \omega$ gewählt, so tritt Resonanz ein und der Ausschlag nähert sich einem Endwerte, der sich mit genügender Annäherung wie folgt darstellen lässt (l. c. S. 746):

$$A_{\max} = \frac{AT}{2\pi kK} \quad (5)$$

wo $K = 2ml^2$ das Trägheitsmoment, $k = 4 \ln \vartheta / T$ die Dämpfungskonstante und ϑ das Verhältniss zweier aufeinander folgenden Ausschläge bedeutet.

Setzen wir hier aus Gl. (4) den Wert von A ein, so erhalten wir

$$A_{\max} = \frac{2\Omega \cos \varphi}{k} = \frac{T\Omega \cos \varphi}{2 \ln \vartheta} \quad (6)$$

welcher Ausdruck mit genügender Annäherung mit der Gl. (4) in der Arbeit von Eötvös übereinstimmt, da hier $\int a^2 dm = K_0 = 2ml^2$ ist und $T'_0 = T$ gesetzt werden darf.

In den Versuchen von Eötvös war $T=20$ bis 30 , also im Mittel 25 Sekunden, und der Lichtzeiger des gedrehten und schwingenden Balkens beschrieb auf einem Schirm in 5 Meter Entfernung Kreise von ungefähr 1 Meter Durchmesser. Hieraus, sowie aus $\varphi=47.5^\circ$ ergeben sich die annähernden Werte:

$$A_{\max}=0.05, k=10^{-3} \text{ und } \vartheta=1,006$$

4. Wir kehren nun zu unserem unter $a)$ vorgeschlagenen Versuche zurück, wo der Balken um seine nördlich-südliche Ruhelage in Torsionalschwingungen gesetzt wird. Bezeichnet a den momentanen Ausschlagswinkel, so ist auch jetzt $y=l \sin a$, anstatt $a = \omega t$ haben wir aber — die Bedingung, dass für $t=0$ auch $a=0$ sei, festhaltend — zu setzen:

$$a = a \sin \omega t, \quad (7)$$

wo a die Amplitude der horizontalen Schwingungen bezeichnet, und somit:

$$y = l \sin (a \sin \omega t) \quad (8)$$

Für Werte von $a \leq \pi/4$ können wir innerhalb einer Fehlergrenze von etwa 2% setzen:

$$\sin a = a - a^3/6, \text{ also}$$

$$y = l \left(a \sin \omega t - \frac{a^3}{6} \sin^3 \omega t \right), \text{ oder, da}$$

$$\sin^3 \omega t = \frac{3}{4} \sin \omega t - \frac{1}{4} \sin 3\omega t$$

$$y = la \left(1 - \frac{3a^2}{24} \right) \sin \omega t + l \frac{a^3}{24} \sin 3\omega t \quad (9)$$

$$\text{und } \frac{dy}{dt} = l\omega a \left(1 - \frac{a^2}{8} \right) \cos \omega t + l\omega \frac{a^3}{8} \cos 3\omega t. \quad (10)$$

Hiernach besteht die mit dy/dt proportionale Schwereänderung aus zwei Gliedern. Das erste Glied ist von der Kreisfrequenz ω , wie im Falle der gleichmässigen Drehung, unterscheidet sich aber von dem, für diesem Fall gültigen Werte von $dy/dt = l\omega \cos \omega t$ durch den Faktor $a(1 - a^2/8)$; das zweite Glied besitzt die Kreisfrequenz 3ω und den Zahlenfaktor $a^3/8$. Diese Faktoren haben bei verschiedener Grösse von a die in der Tabelle I. zusammengestellten Werte:

Tabelle I.

a	$a(1 - a^2/8)$	$a^3/8$
$\pi/4$	0,725	0,061
$\pi/8$	0,385	0,008

Wie hieraus ersichtlich, ist das erste Glied 0,7-mal bzw. 0,4-mal kleiner — bei einer Amplitude von 45° resp. $22,5^\circ$ — als im Falle der gleichmässigen Drehung, bewirkt also unter gleichen Verhältnissen wie beim Versuch von Eötvös einen Ausschlag des Lichtzeigers gleich 0,7 bzw. 0,4 Meter; die Wirkung des zweiten Gliedes dagegen ist gänzlich zu vernachlässigen, schon infolge einer Kleinheit und noch mehr infolge der scharfen Resonanz.¹

5. Der unter b) erwähnte Versuch ist quantitativ ebenso leicht zu behandeln. Die Ruhelage ist jetzt die ost-westliche Richtung. Bezeichnen wir mit β den momentanen Ausschlagwinkel, so ist für den am Balkenende befindlichen Massenpunkt

$$y = l \cos \beta = l \cos(b \cos \omega t) \quad (11)$$

mit b den grössten Ausschlagwinkel bezeichnend, wo der Balken im Zeitpunkt $t=0$ verweilt.

Mit der gleichen Annäherung, wie oben können wir setzen:

$$\cos \beta = 1 - \beta^2/2, \text{ also}$$

$$y = l \left(1 - \frac{b^2}{2} \cos^2 \omega t \right) \text{ und}$$

$$\frac{dy}{dt} = l b^2 \cos \omega t \sin \omega t = \frac{1}{2} l b^2 \sin 2\omega t. \quad (12)$$

In diesem Falle hat also die die Balkenschwingungen bewirkende Kraft — wie vorauszusehen war — die doppelte Frequenz der Torsions-Schwingungen; sie bleibt daher — infolge ihrer Kleinheit und eher noch infolge der scharfen Resonanz — unwirksam. Daher könnte dieser Versuch — wie schon oben bemerkt — zur Kontrolle des ersten dienen, und dies dürfte als ein Vorteil gegenüber der Eötvös'schen Anordnung angesehen werden, wo ein solcher Gegenversuch nicht möglich war.²

6. Wir haben uns bisher in der Erklärung der zu erwartenden Erscheinungen strikt an den Gedankengang von Eötvös gehalten. — Es ist aber klar, dass der von ihm benutzte Ausdruck »Schwereänderung« zu eng gefasst und nur durch die bekannte Entstehungsgeschichte seiner Arbeit zu erklären ist. Auf den gedrehten Balken, wie auf jeden relativ zur Erde bewegten Körper wirken nach bekannten Sätzen der Mechanik im allgemeinen die Coriolis'schen Kräfte, von denen die hier behandelten »Schwereänderungen« nur eine Komponente darstellen. Man überzeugt sich leicht, dass z. B. auf die zwei Massen des gedrehten Balkens auch noch ein, ebenfalls periodisches, horizon-

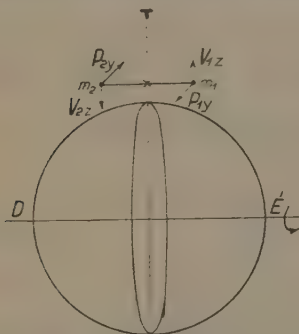
¹ Wie scharf hier die Resonanz ist, ist aus den folgenden Angaben ersichtlich: Aus $\theta = 1,006$ ergibt sich für den Fall vollkommener Resonanz ein Multiplikationsfaktor gleich 500; dieser vermindert sich auf 450 bzw. auf 50 bei einer Verstimmung um 1 Promill bzw. um 1 Prozent. Demzufolge ist die Wiederholung des Eötvös'schen Versuches keine leichte Aufgabe.

² Die Anordnung selbst ist hierzu sehr wohl geeignet, da man dem Drehgestell der Waage in einfacher Weise eine periodische Hin- und Herdrehung erteilen könnte.

tales Kräftepaar $F' = (4ml^2 \Omega \omega \sin \varphi \sin \varepsilon) \cos \omega t$ wirkt, wo ε den Ausschlagswinkel des Balkens bedeutet.

In den Versuchen von *Eötvös* blieb dieses Drehmoment infolge der Kleinheit des Winkels ε unwirksam, *prinzipiell* ist aber die Theorie des *Eötvös'schen* Versuches (auch in der von weil. Prof. I. Fröhlich in der zitierten ungarischen Veröffentlichung gegebenen ausführlichen Darstellung) nur für die Gegend des Äquators, für $\varphi = 0$, richtig.

Aber auch hier tritt noch eine Komplikation auf. Sobald nämlich der Balken in Schwingung kommt, rufen die vertikal nach oben oder nach unten



Abl. 2.
Coriolis'sche Kräfte am Äquator. Vertikale Geschwindigkeiten (V_z) der Massen m_1 , m_2 rufen horizontale Coriolis'sche Kräfte (P_y) hervor und umgekehrt.

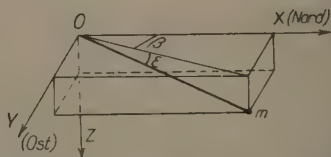


Abb. 3.
Das benutzte Koordinatensystem

gerichteten Geschwindigkeiten der beiden Massen horizontal gerichtete *Coriolis'sche* Kräfte bzw. ein solches Kräftepaar hervor, wie auf Abb. 2. dargestellt. Wird der Balken durch ein Uhrwerk od. dgl. zwangsweise in gleichmässiger Drehung gehalten, so wird dieses äusserst schwache Drehmoment von dem betreffenden Mechanismus aufgenommen. Ist aber der Balken — wie in der von uns vorgeschlagenen Anordnung — auf einen Torsionsdraht aufgehängt, so gerät der Balken unter der Wirkung dieses Kräftepaars in Torsionsschwingungen von allmählich zunehmender Schwingungsweite — und *vice versa*: d. h. durch die *Coriolis'schen* Kräfte wird eine Koppelung zwischen den beiden Schwingungsarten hergestellt und das gleiche gilt — *mutatis mutandis* — für jedes schwingungsfähige System mit zwei Freiheitsgraden.

Es ist ein Leichtes, die Bewegungsgleichungen unserer Anordnung aufzuschreiben. Einfachheitshalber sollen die Dämpfungskräfte vernachlässigt werden; der Beobachtungsort soll am Äquator liegen, und die Orientierung des Koordinatensystems sei die frühere. Die Ruhelage des Balkens sei horizontal und liege in der Meridianebene; es sei β sein momentaner Azimut und

sein momentaner Neigungs- oder Ausschlagwinkel. Dann sind die Koordinaten des Balkenendpunktes m laut Abb. 3.

$$x = l \cos \varepsilon \cos \beta$$

$$y = l \cos \varepsilon \sin \beta$$

$$z = l \sin \varepsilon, \quad \text{oder } \beta \text{ und } \varepsilon \text{ als sehr klein}$$

vorausgesetzt:

$$\left. \begin{aligned} x &= l \\ y &= l\beta \\ z &= l\varepsilon \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Eine Bewegung in der Richtung der Z-Achse erzeugt eine Coriolis'sche Kraft

$$P_x = 2\Omega m \frac{dz}{dt};$$

Die Bewegung entlang der X-Achse eine Kraft

$$P_x = -2\Omega m \frac{dy}{dt}.$$

Somit lauten die Bewegungsgleichungen für die Torsionsschwingungen, bzw. für die Balkenschwingungen:

$$\left. \begin{aligned} 2ml^2 \frac{d^2\beta}{dt^2} + 2ml^2\Omega \frac{dz}{dt} + D\beta &= 0 \\ 2ml^2 \frac{d^2\varepsilon}{dt^2} - 2ml^2\Omega \frac{dy}{dt} + 2mgs\varepsilon &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

wo D die Direktionskraft des Torsionsdrahtes und s , wie oben, den Schwerpunktsabstand der Schneide bezeichnet. Führen wir hier die Werte von x und y aus (13) ein, wählen wir zum Zwecke der Resonanz $2mgs = D$ und setzen wir

$$\frac{D}{2ml^2} = \frac{2mgs}{2ml^2} \quad \omega^2$$

so nehmen die Gl. (15) die Form an:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\beta}{dt^2} + 2\Omega \frac{d\varepsilon}{dt} + \omega^2 \beta &= 0 \\ \frac{d^2\varepsilon}{dt^2} - 2\Omega \frac{d\beta}{dt} + \omega^2 \varepsilon &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Es sind dies die wohlbekannten Differentialgleichungen gekoppelter Schwingungen. Wird $\Omega \ll \omega$ vorausgesetzt und wird für $t = 0$ $\varepsilon = 0$ vorgeschrieben, dann lautet die Lösung bekanntlich:

$$\left. \begin{aligned} \beta &= a \sin \omega t \cos \Omega t \\ \varepsilon &= a \sin \omega t \sin \Omega t \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Es ist fast überflüssig, den Inhalt dieser Gleichungen auch noch in Worten auszudrücken: Beide Schwingungen behalten ihre Grundfrequenz ω , sie werden aber mit der Frequenz Ω moduliert und zwar so, dass die Maxima der einen Schwingung mit den Minima der anderen zusammenfallen, was zur Folge hat, dass die Energie des Systems zwischen den beiden Freiheitsgraden hin und her pendelt.

Wir wollen die Sache noch von einer anderen Seite her beleuchten. Führen wir an Stelle von β und ε die rechtwinkligen Koordinaten des Balkenendpunktes, y und z ein, so haben wir an Stelle von (16) die Gleichungen:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 y}{dt^2} + 2\Omega \frac{dz}{dt} + \omega^2 y &= 0 \\ \frac{d^2 z}{dt^2} - 2\Omega \frac{dy}{dt} + \omega^2 z &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (16a)$$

und ihre Lösung lautet:

$$\left. \begin{aligned} y &= la \sin \omega t \cos \Omega t \\ z &= la \sin \omega t \sin \Omega t \end{aligned} \right\} \quad (17a)$$

Wie ersichtlich, haben wir es hier mit einer vollständigen Analogie eines in der Gegend des Erdpols schwingenden *Foucaultschen* Pendels zu tun: die Differentialgleichungen (16a) sind identisch mit denen eines solchen Pendels von der Kreisfrequenz ω , und im Sinne der Gleichungen (17a) beschreibt der Endpunkt unseres Waagebalkens ebenso, wie die Spitze des *Foucaultschen* Pendels in der mit dem Äquator parallelen XY-Ebene die bekannte Präzessionsbewegung mit der Winkelgeschwindigkeit Ω der Erddrehung.

Aus dieser Analogie folgt, dass unsere Vorrichtung und — mutatis mutandis — ein jedes schwingungsfähige System mit zwei Freiheitsgraden sich in einer beliebigen Gegend der Erde in ähnlicher Weise verhalten wird, nur wird die Präzessionsbewegung unter dem Breitengrad φ mit der Drehgeschwindigkeit $\Omega \cos \varphi$ erfolgen, wird also Null sein gerade auf den Polen, wo das Foucaultsche Pendel die volle Erddrehgeschwindigkeit anzeigt.

7. Wir möchten noch einiges sagen über die Art und Weise, wie die hier beschriebenen Versuche zu verwirklichen sind. Die Ausführung der im Punkte erwähnten Versuche a) und b) dürfte auf keine besonderen Schwierigkeiten stossen. Wird für eine reibungsfreie Lagerung des Torsionskopfes gesorgt, so wird es wohl ohne weiteres möglich sein, durch einfaches Hin- und Herdrehen desselben mit freier Hand die Vorrichtung in Horizontalschwingungen zu versetzen, ohne gleichzeitig dem Balken störende (vertikale) Anstösse zu erteilen. Der umgekehrte Vorgang: den Balken in vertikale Schwingungen zu bringen, ohne gleichzeitig der Vorrichtung horizontale Drehimpulse zu erteilen, ist eine schwierigere Aufgabe. Vielleicht kann man dies durch elektrostatische oder elektrodynamische Kräfte bewerkstelligen, die man zwischen den Balken und Teilen der entsprechend ausgestalteten Aufhängevorrichtung periodisch

wirken lässt, wobei man zur Erregung und zur Entdämpfung der Schwingungen vielleicht die Methoden der photoelektrischen Rückkoppelung[5] mit Vorteil anwenden könnte. Doch es würde zu weit führen, wollten wir uns hierüber in Einzelheiten einlassen.

Statt dessen sei es mir erlaubt zu erwähnen, dass die hier mitgeteilten Überlegungen zum Teil noch aus den Jahren 1920—1921 herrühren, also schon 30 Jahre alt sind. Seither, bis vor kurzem, ununterbrochen auf dem Gebiete der industriellen Forschung und Produktion tätig, hatte der Verfasser keine Gelegenheit, diese rein wissenschaftlichen Versuche auszuführen, doch hofft er, dies in dem jetzt in Umbau befindlichen Eötvös'schen Institut mit Unterstützung der Ung. Akademie d. Wiss. in nicht allzu ferner Zeit tun zu können.

Bemerkung während der Drucklegung

Inzwischen an dem Originalapparat von Eötvös angestellte Messungen ergaben bei $T = 21,5$ Sek. $\vartheta = 1,033$. Man berechnet daraus für den Multiplikationsfaktor die folgenden Werte:

Bei genauer Resonanz	100
Bei einer Verstimmung um ein Promill	98
« « « « ein Prozent	45

Die Verhältnisse sind also vielmal günstiger, wie im Text angegeben.
10. Nov. 1950.

LITERATUR

1. Ann. d. Phys. IV. Folge, **59**, 743—752, 1919.
2. Matematikai és Természettudományi Értesítő (Math. u. Naturwiss. Anzeiger d. Akademie, ungarisch) XXXVII, 1—28, 1920.
3. Handb. d. Exp. Phys. II., 145—146, Wien—Harms, 1926.
4. Müller—Pouillet, Lehrb. d. Phys. II. Ausg. I. Bd. I. Teil, 495, 1929.
5. P. Selényi, Hung. Acta Physica, 1949, Heft 6

ОБ ОДНОЙ ВОЗМОЖНОСТИ МОДИФИКАЦИИ И УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ВРАЩАЮЩИХСЯ ВЕСОВ ЭТВЕША

(Шеленья П.)

(Резюме)

Автор желает модифицировать общеизвестный эксперимент Этвеша доказывающий изменение в весе двигающихся на поверхности земли тел, заменяя равномерное вращение штатива весов на вращение туда и обратно. Если вращение происходит по направлению север-юг, то коромысло входит в колебание вокруг своей грани (эффект Этвеша), а если вращение происходит по направлению восток-запад, то такой эффект не наблюдается. Если, пропустив штатив, вешать коромысло по его основанию (Рис. 1.), выбрать время крутильных колебаний равным времени колебаний коромысла, и вставить коромысло в меридиан, то получается совершенное подобие маятника Фуко. Колеблющееся коромысло под влиянием сил Кориолиса делает известное прецессионное движение, но в противоположность маятнику Фуко, угловая скорость прецессии равна нулю на полюсах, и достигает своего наибольшего значения (2 86, 164 сек.) на экваторе.

ÜBER DIE STÖRUNGEN IN BANDENSPEKTREN

Von

A. BUDÓ und I. KOVÁCS

SPEKTROSKOPISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen: 18. IV. 1950.)

Das Problem der Störungen in Bandenspektren von zweiatomigen Molekülen wird nach einem einheitlichen Gesichtspunkt, mit Berücksichtigung der Bahn-Spin Wechselwirkung der Elektronen behandelt. Dadurch können auch Störungen zwischen Termen von verschiedener Multiplizität gedeutet werden. Die Theorie wird auf die noch nicht untersuchten Störungsarten $^3\Pi-^1\Pi$, $^3\Pi-^1\Sigma$, $^2\Pi-^2\Pi^*$ und $^3\Pi-^3\Pi^*$ angewandt.

I. Mit den Störungen, die in der Rotationsstruktur der Spektren von zweiatomigen Molekülen auftreten, beschäftigen sich mehrere Arbeiten sowohl in theoretischer wie in experimenteller Hinsicht[1]. Da aber verschiedene mögliche Arten von Störungen bisher noch nicht behandelt wurden, bzw. ihre Behandlung nicht ganz zutreffend erscheint[2], wollen wir in dieser Arbeit einen kurzen Überblick über die Störungen geben und anschliessend einige noch nicht untersuchte Störungsarten betrachten.

Das Auftreten von Rotationsstörungen erklärt man bekanntlich dadurch, dass man nach der mit vereinfachten Annahmen gewonnenen Lösung der Wellengleichung gewisse, bei der Lösung zunächst vernachlässigte Glieder nach den Methoden der Störungsrechnung berücksichtigt. Benutzt man als Ausgangspunkt das dem *Hundschen* Fall *a* entsprechende Modell, so ist eine Näherungslösung der Wellengleichung in der Produktform

$$\psi = \Phi Ru \quad (1)$$

zu erhalten [3], [4]. Dabei sind Φ bzw. u die Lösungen der Wellengleichung

$$[H_0 - V(r)] \Phi = 0 \quad (2)$$

des Zweizentrensystems bzw. der Wellengleichung des symmetrischen Kreisel; die zugehörigen Eigenwerte $V(r)$ bzw. $V_{rot}(r)$ hängen von dem Kernabstand r ab. R ist die Lösung der Schwingungsgleichung der Kerne; in dieser Gleichung spielt die Rolle der potentiellen Energie die Funktion

$$V(r) + V_{rot}(r) + \bar{H}(r), \quad (3)$$

wo $\bar{H}(r)$ den über die Elektronenbewegung genommenen Mittelwert der Glieder bedeutet, die bei der Separation der gesamten Wellengleichung des Moleküls weggelassen wurden. Es ist bekanntlich

$$V_{rot}(r) = \frac{h^2}{8\pi^2 \mu r^2} [J(J+1) - \Omega^2].$$

Indem man nun für $V(r) + \bar{H}(r)$ (also in Wesentlichen für $V(r)$) eine »glatte« Funktion wählt, die den üblichen Potentialkurven von Molekeln entspricht, erhält man aus der Schwingungsgleichung die Eigenwerte W_0 , die zugleich die Eigenwerte der ganzen Wellengleichung sind und die in bekannter Weise von den Quantenzahlen v, J, Ω abhängen [5].

Die den vernachlässigten Gliedern entsprechenden, mit den Eigenfunktionen Φ Ru berechneten Matrixelemente sind vom Typ $\Delta J=0, \Delta M=0, \Delta \Omega=0, \pm 1$ [6]¹. Das gilt ohne besondere Voraussetzungen für die Funktion Φ . Da aber die Elektronenterme meist nach der Quantenzahl Λ bezeichnet und geordnet werden, ferner wegen gewisser Vereinfachungen in den Matrixelementen ist es zweckmässig, diese nicht nur nach $\Delta \Omega$, sondern ausführlicher, nach der Änderung der zwei Quantenzahlen Λ und Σ (oder Λ und Ω ; $\Omega = \Lambda + \Sigma$) zu charakterisieren. Dies ist streng nur unter der Annahme durchführbar, dass Λ, Σ und S (das die Multiplizität der Terme bestimmt) gute Quantenzahlen sind, d. h. dass sich die Funktion Φ als antisymmetrische Linearkombination aus Produkten von Orts- und Spineigenfunktionen darstellen lässt, aus denen man einen gemeinsamen Faktor $e^{iA\varphi}$ herausheben kann. In diesem Falle ergibt sich für die von Null verschiedenen Matrixelemente, wenn wir die Gesamtheit der Elektronenquantenzahlen mit n bezeichnen²:

$$H(n, v, \Lambda, \Sigma; n, v, \Lambda, \Sigma \pm 1) = \pm i B [J(J+1) - \Omega(\Omega \pm 1)]^{1/2} [S(S+1) - \Sigma(\Sigma \pm 1)]^{1/2} \quad (4)$$

$$H(n, v, \Lambda, \Sigma; n', v', \Lambda \pm 1, \Sigma) = 2(BL_y)(n, v, \Lambda; n', v', \Lambda \pm 1) [J(J+1) - \Omega(\Omega \pm 1)]^{1/2} \quad (5)$$

$$H(n, v, \Lambda, \Sigma; n', v', \Lambda \pm 1, \Sigma \mp 1) = \mp i 2(BL_y)(n, v, \Lambda; n', v', \Lambda \pm 1) [S(S+1) - \Sigma(\Sigma \mp 1)]^{1/2} \quad (6)$$

$$H(n, v, \Lambda, \Sigma; n', v', \Lambda, \Sigma) = C \quad (\text{hier } n \neq n') \quad (7)$$

Diese sind alle diagonal in J, M und S , sie können dementsprechend Zustände von verschiedener Multiplizität nicht verbinden. Die Ausdrücke (BL_y) und C sind von J praktisch unabhängig. Die in allen Quantenzahlen diagonalen Elemente der Störungsmatrix sind, wie schon erwähnt, in der Potentialfunktion (3) berücksichtigt. Es ist aber manchmal zweckmässig, ein aus ihnen herrührendes Glied $B [S(S+1) - \Sigma^2]$ mit der Rotationsenergie zusammengefasst in der Diagonale gesondert aufzuschreiben; dieser Ausdruck lautet:

$$B [J(J+1) - \Omega^2 + S(S+1) - \Sigma^2] \quad (8)$$

Die erwähnte Form der Funktion Φ und der oben angegebenen Matrixelemente ist nur dann streng gültig, wenn man jede Wechselwirkung, die von den Spins herrühren, im *Hamiltonschen* Operator der Gl. (2) vernach-

¹ I. c. [6] Gl-en (28), (29), (13).

² B bedeutet in (4) die (von v abhängige) Rotationskonstante, dagegen in (5) und (6) die Abkürzung für $h^2/8\pi^2 \mu r^2$; L_y ist die y -Komponente des Bahnmimpulsmomentes des Moleküls.

lässt (natürlich mit Ausnahme derjenigen Kopplung der Spins, die sich in der Antisymmetrie der Eigenfunktionen offenbart). Die genaue Form dieser Wechselwirkungen ist bei dem Mehrelektronenproblem nicht endgültig festgelegt, da eine exakte relativistische Formulierung des Mehrkörperproblems noch nicht gegeben wurde. Jedenfalls treten in H_0 Bahn-Spin Kopplungsglieder

$$\sum a_i (\vec{l}_i \vec{s}_i) \quad (9)$$

auf [7], wo die a_i -s von den Koordinaten der Elektronen und, wie bei Molekülen anzunehmen ist, auch vom Kernabstand abhängen. Von den gemischten Gliedern

$(\vec{l}_i \vec{s}_j)$ und von weiteren Gliedern sieht man gewöhnlich ab. Die Spin-Spin Wechselwirkung ist meist viel kleiner als (9); wir lassen sie ausser acht.

Es seien die Eigenwerte und Eigenfunktionen der Gl. (2), ohne Berücksichtigung der Spinwechselwirkungen, $V_0(r)$ und Φ_0 .¹ Der Operator (9) kann als Störung in H_0 betrachtet werden. Es ist mit Hilfe der bekannten Eigen-

schaften der Operatoren \vec{l} , \vec{s} und der Eigenfunktionen Φ_0 leicht zu beweisen, dass die Matrixelemente von (9) Paare von Elektronenzuständen verbinden, für welche $\Delta\Omega = 0$, $\Delta A = 0, \pm 1$, $\Delta S = 0, \pm 1$ sind; die Multiplizität der Zustände kann also auch verschieden sein.

Infolge der Bahn-Spin Wechselwirkung werden die Eigenwerte $V_0(r)$ und Eigenfunktionen Φ_0 auf $V(r)$ bzw. auf Φ verändert. Die Funktionen $V(r)$ bestimmen (nach dem unter der Gl. (2) Gesagten) die einzelnen Schwingungsniveaus und die Werte der Rotationskonstanten B der betreffenden Elektronenzustände, können aber auf die $J(J+1)$ Abhängigkeit der Rotationsterme unmittelbar keinen Einfluss haben. Anders verhält es sich mit den Eigenfunktionen Φ , die, wie man gleich sehen wird, für die Rotationsstörungen von Bedeutung sind.

Störungen der Rotationstermfolgen können auftreten, wenn gewisse Schwingungsrotationsniveaus für denselben J -Wert in unmittelbare Nähe kommen (natürlich ohne Berücksichtigung ihrer Wechselwirkungen); alsdann zeigen die Termwerte in der Umgebung dieser Stelle als Funktion von J einen unregelmässigen Verlauf. In dieser Arbeit werden nur diese Störungen im engeren Sinne behandelt. (Sind die erwähnten ungestörten Niveaus weiter voneinander entfernt, dann ist zwar auch eine gegenseitige Beeinflussung vorhanden, die sich aber regelmässig mit J ändert und so bewirkt sie einerseits, dass die Termkonstanten von ihren »wahren« Werten etwas verschiedene »effektive« Werte haben; andererseits, in bestimmten Fällen, äussert

¹ Die Bestimmung der Potentialkurven $V_0(r)$ und der Eigenfunktionen Φ_0 ist der Gegenstand der verschiedenen Aufbauprinzipien für Molekeln. (Vgl. z. B. den Artikel von F. Hund in Geiger—Scheel, Hdb. d. Phys. Bd. XXIV. 1., 649, 1933.)

ich diese Beeinflussung in der bekannten Λ -Verdoppelung, die ebenfalls regelmässig von J abhängt.)

Man kann voraussetzen, dass auf einmal nur zwei Multiplett-Terme mit gleichem J -Werte nahe zueinander kommen. In diesem Sinne sprechen wir z. B. von einer ${}^2\Pi - {}^2\Pi^*$ Störung. Dann muss man ein Säkularproblem lösen und der Einfluss der weiteren, ferner liegenden Terme kann nachher mit der Störungsrechnung von nichtentarteten Systemen berücksichtigt werden. Da aber der Einfluss der letzteren Terme klein ist, ausserdem mit J regelmässig verläuft, braucht man diesen letzten Schritt nicht immer auszuführen.

Die Matrixelemente des Säkularproblems sind nach dem Obigen nicht unmittelbar durch die Gleichungen (4)–(7) gegeben, da diese mit den Funktionen $\Phi_0 R u$ und nicht mit $\Phi R u$ berechnet wurden. Für das Weitere kann man zwei Fälle unterscheiden:

1. Sind die Matrixelemente von $\Sigma a_i(l_i s_i)$ klein gegen die Abstände der entsprechenden (ungestörten) Potentialkurven $V_0(r)$ des Zweizentrensystems, dann sind die Eigenwertstörung eines Terms Λ, Σ in erster Näherung der Mittelwert von $\Sigma a_i(l_i s_i)$, der sich in der Form $A(r)\Lambda\Sigma$ schreiben lässt.¹ $A(r)$ bestimmt die Multiplettaufspaltung eines anfänglich entarteten Elektronenzustandes mit festem Λ und verschiedenen Werten von Σ . In der Kernschwingungsgleichung steht daher als potentielle Energie die Funktion $V(r) = V_0(r) + A(r)\Lambda\Sigma$; das letzte Glied kann als kleine Störung behandelt werden, somit haben die Diagonalelemente der Säkulardeterminante die Form (vgl. die Gl. (8)):

$$W_0 + \Lambda\Lambda\Sigma + B[J(J+1) - \Omega^2 + S(S+1) - \Sigma^2], \quad (10)$$

wobei A über die Kernschwingung genommenen Mittelwert von $A(r)$ bedeutet.

Die Eigenfunktion eines Termes (Λ, Ω) ist infolge der erwähnten Eigenschaft des Operators (9) eine Linearkombination aus Eigenfunktionen von Termen (Λ, Ω) , $(\Lambda \pm 1, \Omega)$, die auch verschiedene Multiplizität haben können. So ist z. B.

$$\begin{aligned} \Phi({}^3\Pi_0) = & c\Phi_0({}^3\Pi_0) + \gamma_1\Phi_0({}^3\Sigma_0) + \gamma_2\Phi_0({}^3\Sigma_0^-) + \gamma_3\Phi_0({}^1\Sigma_0^+) \\ & + \gamma_4\Phi_0({}^1\Sigma_0^-) + \gamma_5\Phi_0({}^3\Pi_0') + \dots \end{aligned} \quad (11)$$

Die nicht aufgeschriebenen Glieder beziehen sich auf die übrigen ${}^3\Sigma_0^+$, ${}^3\Sigma_0^-$, ${}^1\Sigma_0^+$, ... Terme. Unter den Koeffizienten hat z. B. γ_1 die Bedeutung:

$$\gamma_1 = \frac{\int \Phi_0^*({}^3\Sigma_0) \Sigma a_i(l_i s_i) \Phi_0({}^3\Pi_0) d\tau}{V_0({}^3\Pi_0) - V_0({}^3\Sigma_0^+)} \quad (12)$$

¹ Dieser Wert ist zugleich der Mittelwert des Operators $A(\vec{L}\vec{S})$, da nach der Voraussetzung Λ und Σ gute Quantenzahlen bedeuten. Daher findet man in der Literatur die Bahn-Spin Wechselwirkung oft in der Form $A(\vec{L}\vec{S})$, das ist aber bei höheren Näherungen unzulässig. (Vgl. J. H. Van Vleck. Phys. Rev. **40**, 544, 1932., S. 558.)

Nach der Voraussetzung sind die γ_i -s klein gegen 1, während c in erster Näherung gleich 1 gesetzt werden kann. Die gesuchten Matrixelemente H'_{ik} setzen sich dann wegen $H'_{ik} = \int (\Phi R u)_i^* H (\Phi R u)_k d\tau'$ aus den Elementen H_{ik} von (4) bis (7) linear zusammen, z. B.:

$$H'(^3\Pi_0; ^1\Pi_1) = \bar{\gamma}_3 H(^1\Sigma_0; ^1\Pi_1) + \gamma_4^* H(^1\Sigma_0; ^1\Pi_1) + \dots \quad (13)$$

$$H'(^3\Pi_0; ^3\Pi_1) = H(^3\Pi_0; ^3\Pi_1) + \gamma_1^* H(^3\Sigma_0; ^3\Pi_1) + \dots \quad (14)$$

(Die $\bar{\gamma}_i$ -s sind näherungsweise die Mittelwerte von γ_i über die Kernschwingung.) Glieder zweiter Ordnung in γ_i sind in jedem Falle zu vernachlässigen, in Elementen vom Typ (14) können wir auch die Glieder mit $\bar{\gamma}_i$ fortlassen.

2. Kommen zwei oder mehrere von der Kurven $V_0(r)$ solcher Elektronenzustände, zwischen denen es Matrixelemente des Operators (9) gibt, einander sehr nahe, dann ergeben sich die Potentialkurven $V(r)$ aus der Lösung eines Säkularproblems, so dass die Termkomponenten eines Multipletts (ohne Berücksichtigung der Rotationsstörung) nicht die einfache Form (10) annehmen. Die Eigenfunktionen Φ haben zwar auch in diesem Falle die Form (11), aber mit anderer Bedeutung der Koeffizienten, insbesondere können c und einige unter den γ_i -s ungefähr gleiche Beträge haben. Da in diesem Falle die Quantenzahlen Λ , Σ und S ihre Bedeutung verlieren und nur die Summe $\Lambda + \Sigma = \Omega$ definiert ist (Hundscher Fall c), können die störenden Terme (oder einer von ihnen) nicht mit z. B. $^3\Pi$, $^1\Pi$ usw. bezeichnet werden. Wenn wir jedoch annehmen, dass dies in bestimmten Fällen näherungsweise erlaubt ist und die Matrixelemente H'_{ik} berechnen, dann sind in diesen die im Fall 1. [unter (14)] erwähnten Vereinfachungen nicht zulässig. Die J -Abhängigkeit der entsprechenden Matrixelemente ist aber dieselbe wie im Falle 1., da für diese Abhängigkeit nach den Gl.-n (4)–(7) nur die Änderung von Ω massgebend ist.

Die mit der Rotationsstörung verknüpfte Säkulardeterminante kann in jedem Falle in ein Produkt von zwei Determinanten zerlegt werden. Man kann nämlich, wenn man statt der Gesamteigenfunktionen $\psi(\Lambda, \Sigma)$ und $\psi(-\Lambda, -\Sigma)$ eines im Ausgangssystem entarteten Termes $|\Lambda|, |\Sigma|$ die Eigenfunktionen $\psi^\pm = 2^{-1/2} [\psi(\Lambda, \Sigma) \pm \psi(-\Lambda, -\Sigma)]$ zugrunde legt, die Terme in zwei Klassen einordnen, die bezüglich der Spiegelung sämtlicher Teilchen am Koordinatenursprung bei gleichem J entgegengesetzte Symmetrie (+ und –) aufweisen und zwischen denen es keine Matrixelemente gibt (da die erwähnte Spiegelung die bei der Separation der Wellengleichung vernachlässigten Glieder invariant lässt). Wir geben im folgenden die Matrixelemente in diesem + bzw. – Termsystem an; Elemente, die in den zwei Systemen verschieden sind, werden mit der Überschrift \pm bezeichnet. Diese Elemente bewirken, dass die entsprechenden Wurzeln der zwei Säkulargleichungen ein wenig verschieden sind, was sich in der Feinaufspaltung (Λ -Verdoppelung bei Π -Termen) offenbart.

Bei der expliziten Angabe der Matrixelemente wird von den zwei oben erwähnten Fällen der Fall 1. angenommen, die Resultate sollen aber, wie aus

dem Späteren hervorgeht, mit einigen Änderungen auch für den Fall 2. gültig sein. Wenn die störenden Terme verschiedene Multiplizität haben, kann man grössere Störungen gerade im Fall 2. erwarten, da dann nach dem oben Gesagten die Matricelemente grössere Beträge annehmen können.

II. Einige Arten von Rotationsstörungen, die bisher untersucht worden sind, können auch ohne Berücksichtigung der Bahn-Spin Wechselwirkung (9) gedeutet werden [8]. Die Störungen zwischen Termen von verschiedener Multiplizität kann man aber nur mit dieser Wechselwirkung erklären [9], ausserdem zeigt es sich, dass diese auch bei den Störungen zwischen Termen von gleicher Multiplizität eine Rolle spielt [10]¹. Wir werden in der Folge die Störungsarten ${}^3\Pi-{}^1\Pi$, ${}^3\Pi-{}^1\Sigma$, ${}^2\Pi-{}^2\Pi^*$, ${}^3\Pi-{}^3\Pi^*$ untersuchen [12], [13], die bisher unter den oben auseinandergesetzten Gesichtspunkten noch nicht behandelt wurden [2].

${}^3\Pi-{}^1\Pi$ Störungen. In beiden Säkulardeterminanten kommen die Zustände ${}^3\Pi_2$, ${}^3\Pi_1$, ${}^3\Pi_0$ und ${}^1\Pi_1$ vor, die zur Abkürzung der Reihe nach mit den Zahlen 1 bis 4 bezeichnet seien. Dann sind die Matricelemente:

$$\left. \begin{aligned} W_1 &= B[J(J+1)-3] + A; \quad W_2 = B[J(J+1)+1]; \\ W_3 &= B[J(J+1)+1] - A; \quad W_4 = h\nu + B^*[J(J+1)-1] \\ H_{12} &= iB\sqrt{2(J-1)(J+2)}; \quad H_{23} = iB\sqrt{2J(J+1)}; \quad H_{13} = 0 \\ H_{14} &= -ia_{14}\sqrt{(J-1)(J+2)}; \quad H_{24} = \sqrt{2}a_{24}; \quad H_{34} = ia_{34}\sqrt{J(J+1)}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Da die strenge Lösung des Säkularproblems (d. h. die Lösung einer Gleichung vierten Grades) zu unübersichtlichen Formeln führen würde, transformieren wir zuerst die obige Matrix H mit einer unitären Matrix S nach der Formel \tilde{S}^*HS , so dass der ${}^3\Pi$ -Anteil von H Diagonalfarm habe:

$$\left\| \begin{array}{cccc} W'_1 & 0 & 0 & H'_{14} \\ 0 & W'_2 & 0 & H'_{24} \\ 0 & 0 & W'_3 & H'_{34} \\ H'_{41} & H'_{42} & H'_{43} & W'_4 \end{array} \right\| \quad (16)$$

W'_1, W'_2, W'_3 sind die Energiewerte der ${}^3\Pi$ -Komponenten im allgemeinen intermediären Hundschen Kopplungsfall $a-b$ [14] $W'_4 = W_4$ und

$$H'_{i4} = S_{1i}^* H_{14} + S_{2i}^* H_{24} + S_{3i}^* H_{34} \quad (i = 1, 2, 3)^2 \quad (17)$$

¹ Infolge der Bahn-Spin Wechselwirkung sind kleine Störungen auch in der Umgebung der Überkreuzungsstellen von z. B. ${}^3\Sigma_{J+1}^\pm - {}^3\Sigma_{J-1}^\pm$ zu erwarten. Diese sogenannten Nebensterörungen sind in der Tat beobachtet worden, vgl. auch [11].

² Da H_{34} in den zwei Determinanten verschieden ist (H_{34}^\pm), sind die H'_{i4} -s auch verschieden, doch lassen wir die \pm Zeichen fort.

Die Elemente S_{ik} der Transformationsmatrix sind an anderer Stelle angegeben worden¹ [15].

Wie schon erwähnt, interessiert uns nur für die J -Abhängigkeit der Energien in der Umgebung der Überkreuzungsstellen von ungestörten Niveaus W' . Wenn z. B. W'_3 und W'_4 einander kreuzen, liegt an dieser Stelle eine Entartung (bzw. Fast-Entartung) vor. Dementsprechend bringen wir den betreffenden Teil der Matrix in Diagonalform. Die gestörten Energiewerte sind dann in erster Näherung:

$$W''_3 = \frac{1}{2} (W'_3 + W'_4) + \Delta_{34}; \quad W''_4 = \frac{1}{2} (W'_3 + W'_4) - \Delta_{34} \quad (18)$$

$$\text{mit } \Delta_{34} = \sqrt{\left(\frac{W'_3 - W'_4}{2}\right)^2 + |H'_{34}|^2}.$$

(An der Überkreuzungsstelle von W'_1 und W'_4 bzw. von W'_2 und W'_4 sind anstatt der Index 3 die Indizes 1, bzw. 2 zu setzen.)

Eine bessere Näherung kann man z. B. dadurch erhalten, dass man den Einfluss der Niveaus W'_1 und W'_4 nach der Störungsrechnung berücksichtigt. Somit ergibt sich an Stelle von (18):

$$W'''_3 = W''_3 + \frac{|T_{43} H'_{14}|^2}{W''_3 - W'_1} + \frac{|T_{43} H'_{24}|^2}{W''_3 - W'_2}; \quad W'''_4 = W''_4 + \frac{|T_{44} H'_{14}|^2}{W''_4 - W'_1} + \frac{|T_{44} H'_{24}|^2}{W''_4 - W'_2} \quad (18')$$

mit

$$|T_{43}|^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left| \frac{H'_{34}}{\Delta_{34}} \right|^2} \right]; \quad |T_{44}|^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 - \left| \frac{H'_{34}}{\Delta_{34}} \right|^2} \right]$$

Hier sei es bemerkt, dass in dem früher erwähnten Fall 2. formal das gleiche Verfahren angewandt werden kann, nur stehen in diesem Falle in den Elementen $W_1, W_2, W_3, H_{12}, H_{23}$ von (15) an Stelle von A, B Konstanten, die im Allgemeinen in jedem dieser Elemente verschieden sind. Dies bedeutet natürlich, dass die Formeln noch unübersichtlicher werden. Wenn jedoch die Termwerte W'_1, W'_2, W'_3 der ${}^3\Pi$ -Komponenten (von der Umgebung der Störungsstellen abgesehen) von den entsprechenden theoretischen Formeln für den allgemeinen intermediären Fall nicht sehr abweichen, kann man erwarten, dass die abgeleiteten Formeln (18) bzw. (18') in der Umgebung der Störungsstellen angenähert gültig sind. Entsprechendes gilt für die weiter unten betrachteten Störungsarten ${}^3\Pi-{}^1\Sigma$ usw.

¹ A. Budó, l. c. [15], s. Gl. (6). Den Elementen S_{11}, S_{12}, S_{21} der vorliegenden Arbeit entsprechen dort (wegen der abweichenden Definition von S) der Reihe nach S_{33}, S_{32}, S_{23} und umgekehrt. Den hier gewählten Phasen der Matricelemente H_{12}, H_{23} , entsprechend, sollen die S_{ik} der vorliegenden Arbeit die folgenden Phasenfaktoren haben:

$$S_{11}, S_{13}: -1; \quad S_{12}, S_{21}, S_{22}, S_{33}: +1; \quad S_{21}, S_{22}: i; \quad S_{32}: -i.$$

Die im allgemeinen intermediären Fall ${}^3\Pi(a) \rightarrow {}^3\Pi(b)$ gültigen Formeln (18) bzw. (18') vereinfachen sich wesentlich für die *Hundschen* Grenzfälle *a* und *b*.

Im Fall *a* sind in den Gl.-en (17) $S_{ii} = 1$, $S_{ki} = 0$, wodurch die Matrixelemente H'_{ik} und W'_i in den entsprechenden Ausdrücken H_{ik} und W_i in der Gl. (15) übergehen (mit $H_{13} = H_{23} = 0$).

Im idealen Fall *b*, in dem man $A = 0$ setzt, sind bekanntlich:

$$\left. \begin{aligned} W'_1 &= B[(J+1)(J+2)-1]; W'_2 = B[J(J+1)-1]; W'_3 = B[(J-1)J-1]; \\ W'_4 &= h\nu + B^*[J(J+1)-1] \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

und die Matricelemente H'_{ik} in (27) berechnen sich zu (von den hier unnötigen Phasen abgesehen):

$$\begin{aligned} H'_{14} &= \sqrt{\frac{J(J+2)}{2(2J+1)(J+1)}} [\sigma_1(J+1) - \tau]; H'_{24} = \sqrt{\frac{1}{2J(J+1)}} [\sigma_2 J(J+1) - \tau]; \\ H'_{34} &= \sqrt{\frac{(J-1)(J+1)}{2(2J+1)J}} [\sigma_1 J + \tau] \end{aligned} \quad (20)$$

Die Konstanten σ_1 , σ_2 , τ sind mit den α_{14} , α_{24} , α_{34} in (15) durch die Beziehungen $\sigma_1 = \alpha_{14} + \alpha_{34}$, $\sigma_2 = \alpha_{14} - \alpha_{34}$, $\tau = 2(\alpha_{14} + \alpha_{24})$ verknüpft.

${}^3\Pi \rightarrow {}^1\Sigma$ Störungen. Hier erhalten wir in beiden Fällen (${}^1\Sigma^+$, oder ${}^1\Sigma^-$ Term) je eine vierreihige und eine dreireihige Determinante. Für die Störung ist die erstere massgebend, die den ${}^1\Sigma$ Term enthält und deren Elemente von den Gl.-en (15) wiedergegeben werden, mit dem Unterschied:

$$\left. \begin{aligned} W_4 &= h\nu + B^* J(J+1); H_{14} = 0; \\ H_{24} &= i\beta_{24} \sqrt{J(J+1)}; H_{34} = -\sqrt{2} \beta_{34}, \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

wobei B^* die Rotationskonstante des ${}^1\Sigma$ Termes bedeutet.

Mit dem gleichen Verfahren wie bei der ${}^3\Pi \rightarrow {}^1\Sigma$ Störung, erhält man im allgemeinen intermediären Fall von ${}^3\Pi$ für die gestörten Energiewerte die Ausdrücke (18) bzw. (18').

Im Falle ${}^3\Pi(a)$ vereinfachen sich die in diesen Formeln vorkommenden Matrixelemente W'_i und H'_{ik} zu W_i und H_{ik} in den Gl.-en (15) bzw. (21). Da dann $H_{14} = 0$ ist, wird die Komponente ${}^3\Pi_2$ nicht gestört.

Im Falle ${}^3\Pi(b)$ sind W'_1 , W'_2 , W'_3 , bzw. W'_4 aus den Gl.-en (19) bzw. (21) zu entnehmen, während die Matrixelemente sind:

$$\left. \begin{aligned} H'_{14} &= \sqrt{\frac{J+2}{2J+1}} [\beta_{24} J - \beta_{34}]; H'_{24} = \beta_{24} + \beta_{34}; \\ H'_{34} &= \sqrt{\frac{J-1}{2J+1}} [\beta_{24} (J+1) + \beta_{34}] \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

${}^2\Pi - {}^2\Pi^*$ Störungen. Wenn die Zustände ${}^2\Pi_{1/2}$, ${}^2\Pi_{3/2}$ und ${}^2\Pi^*_{1/2}$, ${}^2\Pi^*_{3/2}$ der Reihe nach mit den Zahlen 1 bis 4 bezeichnet werden, sind die Matricelemente :

$$\left. \begin{aligned} W_1 &= \frac{1}{2} A + B [J(J+1) - \frac{7}{4}]; & W_2 &= -\frac{1}{2} A + B [J(J+1) + \frac{1}{4}]; \\ W_3 &= h\nu + \frac{1}{2} A^* + B^* [J(J+1) - \frac{7}{4}]; & W_4 &= h\nu - \frac{1}{2} A^* + B^* [J(J+1) + \frac{1}{4}]; \\ H_{12} &= iB \sqrt{(J-\frac{1}{2})(J+\frac{3}{2})}; & H_{13} &= C; & H_{14} &= i\gamma_{14} \sqrt{(J-\frac{1}{2})(J+\frac{3}{2})} \\ H_{34} &= iB^* \sqrt{(J-\frac{1}{2})(J+\frac{3}{2})}; & H_{24} &= C; & H_{23} &= -i\gamma_{23} \sqrt{(J-\frac{1}{2})(J+\frac{3}{2})} \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Wir transformieren diese Matrix so, dass die beiden ${}^2\Pi$ — Teilmatrizes die Diagonalform annehmen :

$$\begin{pmatrix} W'_1 & 0 & H'_{13} & H'_{14} \\ 0 & W'_2 & H'_{23} & H'_{24} \\ H'_{31} & H'_{32} & W'_3 & 0 \\ H'_{41} & H'_{42} & 0 & W'_4 \end{pmatrix} \quad (24)$$

Hier sind die W'_i die Energiewerte in dem allgemeinen intermediären Fall $a \rightarrow b$ [16]:

$$\left. \begin{aligned} W'_{1,2} &= B \left[(J + \frac{1}{2})^2 - 1 \pm \frac{1}{2} \sqrt{Y(Y-4) + 4(J + \frac{1}{2})^2} \right]; \\ W'_{3,4} &= h\nu + B^* \left[(J + \frac{1}{2})^2 - 1 \pm \frac{1}{2} \sqrt{Y^*(Y^*-4) + 4(J + \frac{1}{2})^2} \right] \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Die Elemente der Transformationsmatrix S berechnen sich zu :

$$S_{11} = iS_{22} = - \sqrt{\frac{u + Y - 2}{2u}}; \quad S_{12} = -iS_{21} = \sqrt{\frac{u - (Y-2)}{2u}} \quad (26)$$

mit $u = \sqrt{Y(Y-4) + 4(J + \frac{1}{2})^2}$

Entsprechende Ausdrücke gelten für die Elemente S_{33} , S_{34} , S_{43} , S_{44} , nur steht in diesen der Kopplungsparameter Y^* statt Y ; die übrigen Elemente sind Null. Die Grössen H'_{ik} setzen sich aus den S_{ik} und H_{ik} auf folgende Weise zusammen :

$$H'_{ik} = S_{1i}^*(H_{13}S_{3k} + H_{14}S_{4k}) + S_{2i}^*(H_{23}S_{3k} + H_{24}S_{4k}) \quad (i=1,2; k=3,4). \quad (27)$$

Die gestörten Energiewerte W'' sind dann in der Umgebung der Überkreuzungen stellen der einzelnen Komponenten in erster Näherung wieder durch die Gleichungen

$$W''_{i,k} = \frac{1}{2} (W'_i + W'_k) \pm \sqrt{\left(\frac{W'_i - W'_k}{2} \right)^2 + |H'_{ik}|^2} \quad (i=1,2; k=3,4). \quad (28)$$

gegeben. Eine bessere Näherung erhält man vollkommen analog wie in den Gl.-en (18').

Spezielle Fälle. Die Energiewerte W' eines ${}^2\Pi(a)$ Termes geben die Gl.-en (23), die eines ${}^2\Pi(b)$ Termes die Gl.-en (25) mit $Y = 0$ bzw. $Y^* = 0$ wieder, während die Matrixelemente die folgende Zusammenstellung enthält:

${}^2\Pi(a) - {}^2\Pi^*(a)$ Störung:

$$H'_{ik} = H_{ik} \quad \text{vgl. (23).}$$

${}^2\Pi(b) - {}^2\Pi^*(a)$ Störung:

$$\left. \begin{aligned} H'_{13} &= i \sqrt{\frac{J - \frac{1}{2}}{2(J + \frac{1}{2})}} [C + \gamma_{23}(J + \frac{3}{2})]; & H'_{23} &= i \sqrt{\frac{J + \frac{3}{2}}{2(J + \frac{1}{2})}} [C - \gamma_{23}(J - \frac{1}{2})] \\ H'_{14} &= - \sqrt{\frac{J + \frac{3}{2}}{2(J + \frac{1}{2})}} [C + \gamma_{14}(J - \frac{1}{2})]; & H'_{24} &= \sqrt{\frac{J - \frac{1}{2}}{2(J + \frac{1}{2})}} [C - \gamma_{14}(J + \frac{3}{2})]. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

${}^2\Pi(b) - {}^2\Pi^*(b)$ Störung:

$$\left. \begin{aligned} H'_{13} &= C + (\gamma_{14} + \gamma_{23}) \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}{2(J + \frac{1}{2})}; \\ H'_{23} &= - \frac{\gamma_{23}(J - \frac{1}{2}) - \gamma_{14}(J + \frac{3}{2})}{2(J + \frac{1}{2})} \sqrt{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}; \\ H'_{14} &= \frac{\gamma_{23}(J + \frac{3}{2}) - \gamma_{14}(J - \frac{1}{2})}{2(J + \frac{1}{2})} \sqrt{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}; \\ H'_{24} &= C - (\gamma_{14} + \gamma_{23}) \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}{2(J + \frac{1}{2})}; \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

${}^3\Pi - {}^3\Pi^*$ Störungen. Die Elemente $W_1, W_2, W_3, H_{12}, H_{23}, H_{13}$, bzw. $W_4, W_5, W_6, H_{45}, H_{56}, H_{46}$ des ${}^3\Pi$ bzw. des ${}^3\Pi^*$ Zustandes sind aus den Gl.-en (15) zu entnehmen. (Die Konstanten der letzteren sind A^*, B^* und in den Diagonalelementen steht noch das Glied $h\nu$.) Die übrigen, die zwei ${}^3\Pi$ Zustände verbindenden Matrixelemente sind:

$$\left. \begin{aligned} H_{14} &= H_{25} = H_{36} = C; & H_{15} &= i\delta_{15}\sqrt{2(J-1)(J+2)}; \\ H_{24} &= i\delta_{24}\sqrt{2(J-1)(J+2)}; & H_{26} &= i\delta_{26}\sqrt{2J(J+1)}; \\ H_{35} &= -i\delta_{35}\sqrt{2J(J+1)} \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

wobei C und die δ -s reelle Konstanten bedeuten.

Mit dem bei der ${}^2\Pi - {}^2\Pi^*$ Störung geschilderten Verfahren erhält man als Ergebnis: die Termwerte werden in der Umgebung der insgesamt 9 Überkreuzungsstellen in erster Näherung wieder durch die Gl.-en (28) mit $i = 1, 2, 3, k = 4, 5, 6$ dargestellt. W'_1, \dots, W'_6 sind die ${}^3\Pi$ -Energiewerte im allgemeinen intermediären Fall; es ist ferner:

$$\begin{aligned} H'_{ik} &= S_{1i}^*(H_{14}S_{4k} + H_{15}S_{5k}) + S_{2i}^*(H_{24}S_{4k} + H_{25}S_{5k} + H_{26}S_{6k}) \\ &+ S_{3i}^*(H_{35}S_{5k} + H_{36}S_{6k}) \quad (i = 1, 2, 3; k = 4, 5, 6) \end{aligned} \quad (32)$$

[Die S_{mn} bedeuten die Elemente der zu ${}^3\Pi$ Termen gehörigen, unter (17) erwähnten Transformations-Matrizes.] Die Formeln für eine bessere Näherung sind ähnlich wie die Gl.-en (18'), z. B. im Falle der Überkreuzung der Niveaus 3 und 4 gilt:

$$\begin{aligned} W_4''' = W_4'' + |T_{44}|^2 \left(\frac{|H_{41}'|^2}{W_4'' - W_1'} + \frac{|H_{42}'|^2}{W_4'' - W_2'} \right) \\ + |T_{34}|^2 \left(\frac{|H_{35}'|^2}{W_4'' - W_5'} + \frac{|H_{36}'|^2}{W_4'' - W_6'} \right) \end{aligned} \quad (33)$$

mit den in den Gl.-en (18') gegebenen Werten von $|T_{44}|$ und $|T_{34}| (= |T_{43}|)$.

Wir geben noch die expliziten Ausdrücke von H'_{ik} in speziellen Fällen wieder:

${}^3\Pi(a) - {}^3\Pi^*(a)$ Störung:

$$H'_{ik} = H_{ik} \quad \text{vgl. (31)}$$

${}^3\Pi(a) - {}^3\Pi^*(b)$ Störung:

$$\begin{aligned} H'_{14} &= \sqrt{\frac{2J(J-1)}{(2J+1)(J+1)}} \left[\frac{1}{2} C + \delta_{15}(J+2) \right]; \\ H'_{24} &= -i \sqrt{\frac{J(J+2)}{(2J+1)(J+1)}} \left[C + \delta_{24}(J-1) + \delta_{26}(J+1) \right]; \\ H'_{15} &= - \sqrt{\frac{2(J-1)(J+2)}{J(J+1)}} \left[\frac{1}{2} C + \delta_{15} \right]; \\ H'_{25} &= +i \sqrt{\frac{1}{J(J+1)}} \left[C + \delta_{24}(J-1)(J+2) - \delta_{26}J(J+1) \right]; \\ H'_{16} &= - \sqrt{\frac{2(J+1)(J+2)}{(2J+1)J}} \left[\frac{1}{2} C - \delta_{15}(J-1) \right]; \\ H'_{26} &= -i \sqrt{\frac{(J-1)(J+1)}{(2J+1)J}} \left[C - \delta_{24}(J+2) - \delta_{26}J \right]; \\ H'_{34} &= - \sqrt{\frac{2(J+2)}{2J+1}} \left[\frac{1}{2} C + \delta_{35}J \right]; \\ H'_{36} &= \sqrt{\frac{2(J-1)}{2J+1}} \left[\frac{1}{2} C - \delta_{35}(J+1) \right]; \\ H'_{35} &= - \sqrt{2} \left[\frac{1}{2} C - \delta_{35} \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

$^3\Pi(b) \rightarrow ^3\Pi^*(b)$ Störung :

$$\left. \begin{aligned} H'_{14} &= C + \frac{J(J+2)}{(2J+1)(J+1)} [(\delta_{15} + \delta_{24})(J-1) + (\delta_{26} + \delta_{35})(J+1)] ; \\ H'_{15} &= -\frac{1}{J+1} \sqrt{\frac{J+2}{2J+1}} [\delta_{15}(J-1) + \delta_{24}(J-1)(J+2) \\ &\quad - \delta_{26}J(J+1) + \delta_{35}(J+1)] ; \\ H'_{16} &= \frac{\sqrt{(J-1)(J+2)}}{2J+1} [\delta_{15}(J-1) - \delta_{24}(J+2) - \delta_{26}J + \delta_{35}(J+1)] ; \\ H'_{24} &= -\frac{1}{J+1} \sqrt{\frac{J+2}{2J+1}} [\delta_{15}(J-1)(J+2) + \delta_{24}(J-1) \\ &\quad + \delta_{26}(J+1) - \delta_{35}J(J+1)] ; \\ H'_{25} &= C + \frac{1}{J(J+1)} [(\delta_{15} + \delta_{24})(J-1)(J+2) - (\delta_{26} + \delta_{35})J(J+1)] ; \\ H'_{26} &= \frac{1}{J} \sqrt{\frac{J-1}{2J+1}} [-\delta_{15}(J-1)(J+2) + \delta_{24}(J+2) + \delta_{26}J + \delta_{35}J(J+1)] ; \\ H'_{34} &= \frac{\sqrt{(J-1)(J+2)}}{2J+1} [-\delta_{15}(J+2) + \delta_{24}(J-1) + \delta_{26}(J+1) - \delta_{35}J] ; \\ H'_{35} &= \frac{1}{J} \sqrt{\frac{J-1}{2J+1}} [\delta_{15}(J+2) - \delta_{24}(J-1)(J+2) + \delta_{26}J(J+1) + \delta_{35}J] ; \\ H'_{36} &= C - \frac{(J-1)(J+1)}{(2J+1)J} [(\delta_{15} + \delta_{24})(J+2) + (\delta_{26} + \delta_{34})J] . \end{aligned} \right\} (35)$$

Über einige Anwendungen der hier erhaltenen Ergebnisse vgl. die unten zitierten Arbeiter [17], [13].

LITERATUR

1. G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure I., New-York, 1939, S. 306 ff.
2. B. I. Stepanov, Journ. of Phys. (USSR) **2**, 81, 1940. **4**, 411, 1941.
3. J. H. Van Vleck, Phys. Rev. **33**, 467, 1929.
4. R. De L. Kronig, Band Spectra and Molecular Structure, Cambridge, 1930.
5. C. Pekeris, Phys. Rev. **45**, 98, 1934.
6. J. H. Van Vleck, Journ. Chem. Phys. **4**, 332, 1936.
7. W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **39**, 499, 1926. G. Breit, Phys. Rev. **34**, 553, 1929. **36**, 383, 1930. **39**, 616, 1932.
8. R. De L. Kronig, ZS. f. Phys. **50**, 347, 1928. G. P. Ittmann, ZS. f. Phys. **71**, 616, 1931.
9. G. H. Dieke, Phys. Rev. **47**, 870, 1935. I. Kovács, ZS. f. Phys. **106**, 431, 1937. **109**, 387, 1938.
10. A. Budó und I. Kovács, ZS. f. Phys. **109**, 393, 1938. **111**, 633, 1939.
11. I. Kovács, ZS. f. Phys. **111**, 640, 1939.
12. L. Gerő und R. Schmid, ZS. f. Phys. **112**, 679, 1939. **116**, 248, 1940.
13. R. Schmid und L. Gerő, ZS. f. Phys. **94**, 386, 1935. **112**, 676, 1939. L. Gerő, ZS. f. Phys. **100**, 374, 1936. Ann. d. Phys. (5), **35**, 597, 1939.

13. R. Barrow, A. Lagerqvist, E. Lind, Proc. Phys. Soc. A. **63**, 1132, 1950. I. Kovács und A. Lagerqvist, Ark. f. Fys. **2**, 411, 1950. Journ. Chem. Phys. **18**, 1683, 1950.
14. A. Budó, ZS. f. Phys. **96**, 219, 1935.
15. A. Budó, ZS. f. Phys. **105**, 579, 1937.
16. E. L. Hill und J. H. Van Vleck, Phys. Rev. **32**, 250, 1928.
17. I. Kovács, Act. Phys. Hung. **1**, 97, 1951.

БОССМУЩЕНИЯ В ПОЛОСАТЫХ СПЕКТРАХ

(А. Будо и И. Ковач)

(Резюме)

Рассматриваются с одной теоретической точки зрения проблемы возмущений встречавшихся в полосатых спектрах двухатомных молекул, причем имеются в виду магнитные взаимодействия между механическими и спиновыми моментами отдельных электронов. С помощью этого делается возможным и истолкование возмущений между термами различной кратности. Теория была применена к возмущениям, до сих пор не исследованным.

BER DIE BERECHNUNG DER ROTATIONS KONSTANTEN VON ZWEIATOMIGEN MOLEKÜLTERMEN AUF GRUND VON STÖRUNGS DATEN II¹

Von
I. KOVÁCS

SPEKTROSKOPISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen: 18. IV. 1950.)

Das eine von den drei Verfahren, die zur Berechnung der Konstanten von störenden Molekültermen früher angegeben wurden, wird auf alle Störungen (Singulett- und Triplettstörungen) ausgedehnt, die in Verbindung mit Singulett-Übergängen praktisch vorkommen können. Die Methode beruht auf der Beobachtung von mindestens zwei überzähligen Linienpaaren an der Störungsstelle und führt zu unmittelbar anwendbaren Formeln.

1. Bekanntlich treten in Molekülspektren manchmal Abweichungen von dem regelmässigen Verlauf der Bandenlinien auf; diese Erscheinung wird als Störung bezeichnet. Theoretische Untersuchungen haben gezeigt, dass die Störungen von der quantenmechanischen Wechselwirkung von zwei verschiedenen Rotationstermfolgen herrühren, bzw. gedeutet werden können. Die eine dieser Termfolgen, die an dem zur Bande gehörigen Übergang teilnimmt, wird als gestörter, die andere — von der die Störung »verursacht« wird — als störender Term bezeichnet. Da auf die Existenz der störenden Terme meistens nur aus der Beobachtung der Störung geschlossen werden kann (d. h. es gibt meistens keinen Übergang von diesen Termen, der zu einer beobachtbaren Bande führte), ist es erwünscht, Verfahren auszuarbeiten, die die Bestimmung der Konstanten des störenden Termes auf Grund der Störungsdaten ermöglichen. Derartige Verfahren sind schon bekannt, haben aber meistens den Nachteil, dass sie einerseits die Kenntnis der Elemente der Störungsmatrix, andererseits den ungestörten Verlauf des gestörten Termes in der Umgebung der Störungsstelle voraussetzen. Es ist nun möglich, ein Verfahren anzugeben, das die erwähnten Nachteile nicht besitzt und immer anwendbar ist, wenn an der Störungsstelle mindestens zwei überzählige Linienpaare zur Beobachtung kommen. Dieses Verfahren ist bisher nur für eine $^1\Pi-^1\Sigma$ Bande ausgearbeitet worden, wo der $^1\Pi$ Zustand von einem $^1\Sigma$ Terme gestört wird [1]. Das experimentelle Material [2], [3], [4], macht es erwünscht, das erwähnte Verfahren auf alle praktisch vorkommenden Übergänge und Störungen auszudehnen, die mit Singulett-Termen verknüpft sind.

Die Beobachtung von überzähligen Linienpaaren ist für die Berechnung der Konstanten von störenden Termen ausserordentlich wichtig. Man kann

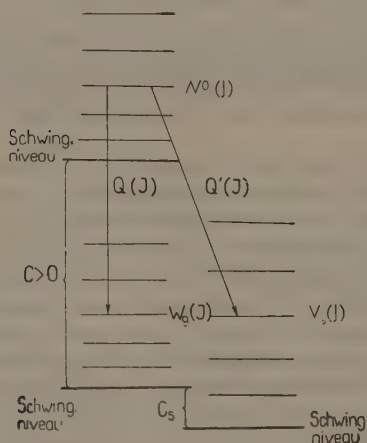
¹ Artikel I der Serie 1. c. [1].

nämlich im Falle von genügend vielen Linienpaaren die erwähnten Konstanten mit einer Genauigkeit berechnen, die bei den Bestimmungen aus Übergängen zu erreichen ist.

2. Wie bekannt, lässt die Störung den arithmetischen Mittelwert der ungestörten Terme unverändert, also z. B. im Falle von zwei einander störenden *Singulett-Termen*

$$\frac{1}{2} (W_g + W_s) = \frac{1}{2} (W_g^0 + W_s^0), \quad (1)$$

wo W_g, W_s die voneinander gestörten [1], W_g^0 und W_s^0 die ungestörten Term-



werte bedeuten.¹ Auf dieser Beziehung gründet sich das folgende verallgemeinerte »Mittelwertverfahren«. Um den Gedankengang der Rechnung zu illustrieren, nehmen wir zunächst keine Spezialisierung der Terme vor und betrachten z. B. den Fall, in dem die Störung im Q- Zweig vorkommt. Bezeichnet $W^0(J)$ den am Übergang teilnehmenden anderen Zustand, der zu der Rotationsquantenzahl J gehört, dann sind die gestörten Termwerte $W_g(J)$ und $W_s(J)$ in der Umgebung der Störungsstelle mit Hilfe des überzähligen Linienpaares $[Q(J), Q'(J)]$ folgendermassen darzustellen :

$$\begin{aligned} W_g(J) &= W^0(J) - \text{sign } C \cdot Q(J) \\ W_s(J) &= W^0(J) - \text{sign } C \cdot Q'(J) \end{aligned} \quad (2)$$

wo C den Abstand der Schwingungsniveaus (ohne Rotation) der zwei Terme bedeutet, die im betrachteten Übergang eine Rolle spielen. In (2) kommt nur

¹ Es ist g der »gestörte«, s der »störende« Zustand.

das Vorzeichen von C vor; wir rechnen C positiv, bzw. negativ, wenn der gestörte Term der untere, bzw. der obere Zustand des Überganges ist. (Zur Erläuterung vgl. Fig.) Aus (1) und (2) folgt

$$2 W^0(J) - \text{sign } C \cdot [Q(J) + Q'(J)] = W_g^0(J) + W_s^0(J) \quad (3)$$

Die Subtraktion der für $J-1$ gültigen entsprechenden Gleichung und Division durch $2J$ ergibt:

$$\frac{1}{J} [W_g^0(J) - W_g^0(J-1)] = \frac{1}{J} [W^0(J) - W^0(J-1)] - \frac{1}{2J} [W_g^0(J) - W_g^0(J-1)] - \text{sign } C \cdot \frac{1}{2J} [Q(J) - Q(J-1) + Q'(J) - Q'(J-1)] \quad (4)$$

setzen wir

$$\left. \begin{aligned} W_g^0(J) &= B_g [J(J+1) - A_g^2]; \quad W_s^0(J) = C_s + B_s [J(J+1) - A_s^2]; \\ W^0(J) &= C + B [J(J+1) - A^2] \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Glieder vom Typ $DJ^2(J+1)^2$ usw. lassen wir fort), dann folgt aus (4) für die gesuchte Rotationskonstante B_s $B_s(Q)$ des störenden Termes:

$$B_s(Q) = 2B - B_g - \text{sign } C \cdot \frac{1}{2J} [Q(J) - Q(J-1) + Q'(J) - Q'(J-1)] \quad (6)$$

Unter Benutzung von (3), (5), (6) ergibt sich für die andere gesuchte Konstante $C_s(Q)$:

$$C_s(Q) = 2(C - A^2 B) + A_g^2 B_g + A_s^2 B_s(Q) + \text{sign } C \cdot \frac{1}{2} \left\{ (J-1) [Q(J) + Q'(J)] - (J+1) [Q(J+1) + Q'(J+1)] \right\} \quad (7)$$

Wenn die Störung in den P - und R -Zweigen auftritt, erhält man auf dem gleichen Wege die Formeln:

im Falle $C > 0$

$$B_s(P) = 2B - B_g - \frac{1}{4J} [P(J) + P'(J) + R(J) + R'(J) - P(J-1) - P'(J-1) - R(J-1) - R'(J-1)] \quad (8)$$

$$C_s(P) = 2[C + B(1 - A^2)] + A_g^2 B_g + A_s^2 B_s(P) + \frac{1}{4} \left\{ (J-1) [P(J) + P'(J) + R(J) + R'(J)] - (J+1) [P(J+1) + P'(J+1) + R(J+1) + R'(J+1)] \right\} \quad (9)$$

und im Falle $C < 0$

$$B_s(P) = 2B - B_g + \frac{1}{4J} [P(J+1) + P'(J+1) + R(J-1) + R'(J-1) - P(J) - P'(J) - R(J-2) - R'(J-2)] \quad (10)$$

$$C_s(P) = 2[C + B(1 - A^2)] + A_s^2 B_s + A_s^2 B_s^-(P) - \frac{1}{4} \left\{ (J-1)[P(J+1) + P'(J+1) + R(J-1) + R'(J-1)] - (J+1)[P(J) + P'(J) + R(J-2) + R'(J-2)] \right\} \quad (11)$$

In Fällen, in denen kein Q -Zweig auftritt ($^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma'$ Übergänge), sind die Ausdrücke $B_s(Q)$ und $C_s(Q)$ natürlich sinnlos.

3. Wie Erfahrungen¹ und theoretische Untersuchungen zeigen [5], [6], können Singulett-Terme auch von Triplett-Termen gestört werden. Die Konstanten des störenden Triplett-Termes sind nicht unmittelbar durch die Gl.-en (6)–(11) gegeben, sie können aber nach einem ähnlichen Verfahren berechnet werden. Einheitliche Ausdrücke, wie im obigen Singulett-Falle, sind wegen der Verschiedenheit der $^3\Sigma$ und $^3\Pi$ Termformeln nicht anzugeben; man muss den Fall von $^3\Sigma$ und $^3\Pi$ Termstörungen gesondert betrachten.

$^3\Sigma$ -Störung. Wir setzen voraus, dass ein Singulett-Term (aus dem ein Übergang zu irgend einem anderen Singulett-Term zustande kommt) von einem $^3\Sigma$ Terme gestört wird. Im Falle der Genauigkeitsgrenzen, die bei der Berechnung der Konstanten des störenden Termes in Betracht kommen, können wir meistens von der Feinaufspaltung des $^3\Sigma$ Termes (die von der Spin-Spin-Kopplung und Rotation-Spin-Kopplung herrührt [7]) absehen und so die Termwerte folgendermassen darstellen:

$$\left. \begin{aligned} W_{s3}^0(J) &= C_{3\Sigma} + B_{3\Sigma}(J+1)(J+2); & W_{s2}^0(J) &= C_{3\Sigma} + B_{3\Sigma}J(J+1); \\ W_{s1}^0(J) &= C_{3\Sigma} + B_{3\Sigma}(J-1)J \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Mit diesen Formeln ergibt sich einerseits, dass für die Konstanten die Gl.-en (6)–(11) gültig sind, wenn diese Konstanten aus der Störung der mittleren Komponente $W_{s2}^0(J)$ (d. h. $K=J$) berechnet werden; anderseits, wenn die Störung von den übrigen zwei Komponenten ($K=J\pm 1$) verursacht wird, erhält man — je nachdem die Störung im Q -Zweige, bzw. in den P und R -Zweigen vorliegt — die folgenden Ausdrücke:

$$\left. \begin{aligned} B_{3\Sigma}(Q) &= \frac{J}{J+1} B_s(Q); & C_{3\Sigma} &= C_s(Q) - B_s(Q) J & \text{für } K=J+1 \\ B_{3\Sigma}(Q) &= \frac{J}{J-1} B_s(Q); & C_{3\Sigma} &= C_s(Q) + B_s(Q) J & \text{für } K=J-1 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned} B_{3\Sigma}^{\pm}(P) &= \frac{J}{J+1} B_s^{\pm}(P); & C_{3\Sigma} &= C_s^{\pm}(P) - B_s^{\pm}(P) J & \text{für } K=J+1 \\ B_{3\Sigma}^{\pm}(P) &= \frac{J}{J-1} B_s^{\pm}(P); & C_{3\Sigma} &= C_s^{\pm}(P) + B_s^{\pm}(P) J & \text{für } K=J-1 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

die Abkürzungen $B_s(Q)$, $C_s(Q)$, $B_s^{\pm}(P)$, $C_s^{\pm}(P)$ sind aus (6)–(11) zu entnehmen; das obere bzw. untere Vorzeichen gilt, je nachdem der gestörte Term der untere bzw. der obere Zustand des Überganges ist.

¹ S. Literatur [2], [3], [4].

$^3\Pi$ -Störung. Die Feinaufspaltung der $^3\Pi$ -Terme ist wegen der verhältnismässig grossen Bahn-Spin-Kopplung (mit der Kopplungskonstante A , bzw. $Y=A/B_{3\Pi}$) nicht zu vernachlässigen; dementsprechend sind die Termwerte im allgemeinen intermediären Kopplungsfall durch die folgenden, etwas verwickelten Ausdrücke darstellbar[8].

$$\left. \begin{aligned} W_{s3}^0(J) &= C_{3\Pi} + B_{3\Pi} [J(J+1) - \frac{1}{3} + 2u^-(J)]; \\ W_{s2}^0(J) &= C_{3\Pi} + B_{3\Pi} [J(J+1) - \frac{1}{3} + 2\varphi_2(J)]; \\ W_{s1}^0(J) &= C_{3\Pi} + B_{3\Pi} [J(J+1) - \frac{1}{3} - 2u^+(J)] \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

mit

$$\left. \begin{aligned} u^-(J) &= \frac{1}{2} [\varphi_1(J) - \varphi_2(J)]; & u^+(J) &= \frac{1}{2} [\varphi_1(J) + \varphi_2(J)], \\ \varphi_1(J) &= \sqrt{Y(Y-4) + \frac{4}{3} + 4J(J+1)}; \\ \varphi_2(J) &= \frac{2}{3} \frac{Y(Y-1) - \frac{4}{9} - 2J(J+1)}{Y(Y-4) + \frac{4}{3} + 4J(J+1)} \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Auf Grund dieser Formeln erhalten wir in dem Falle, wo die Störung im Q -Zweige vorkommt:

$$\left. \begin{aligned} B_{3\Pi}(Q) &= \frac{1}{1+S_2} B_s(Q); & C_{3\Pi}(Q) &= C_s(Q) - \\ & B_s(Q) \left\{ 1 - \frac{1}{1+S_2} \left[\frac{1}{3} + (J-1)u^-(J) - (J+1)u^-(J-1) \right] \right\} & \text{für } ^3\Pi_2, \\ B_{3\Pi}(Q) &= \frac{1}{1+S_1} B_s(Q); & C_{3\Pi}(Q) &= C_s(Q) - \\ & B_s(Q) \left\{ 1 - \frac{1}{1+S_1} \left[\frac{1}{3} + (J-1)\varphi_2(J) - (J+1)\varphi_2(J-1) \right] \right\} & \text{für } ^3\Pi_1, \\ B_{3\Pi}(Q) &= \frac{1}{1-S_0} B_s(Q); & C_{3\Pi}(Q) &= C_s(Q) - \\ & B_s(Q) \left\{ 1 - \frac{1}{1-S_0} \left[\frac{1}{3} - (J-1)u^+(J) + (J+1)u^+(J-1) \right] \right\} & \text{für } ^3\Pi_0^1 \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

¹ Bei den Bezeichnungen $^3\Pi_2$ usw. wurde angenommen, dass es sich um einen normalen (nicht verkehrten) $^3\Pi$ -Term handelt.

dabei sind

$$S_2 = \frac{u^-(J) - u^-(J-1)}{J}; \quad S_1 = \frac{\varphi_2(J) - \varphi_2(J-1)}{J}; \quad S_0 = \frac{u^+(J) - u^+(J-1)}{J} \quad (18)$$

Tritt die Störung in den *P*- und *R*-Zweigen auf, dann gilt:

$$\left. \begin{aligned} B_{3II}(P) &= \frac{1}{1+S_2} B_s^\pm(P); & C_{3II}(P) &= C_s^\pm(P) - \\ & B_s^\pm(P) \left\{ 1 - \frac{1}{1+S_2} \left[\frac{1}{3} + (J-1)u^-(J) - (J+1)u^-(J-1) \right] \right\} & \text{für } {}^3\Pi_2, \\ B_{3II}(P) &= \frac{1}{1+S_1} B_s^\pm(P); & C_{3II}(P) &= C_s^\pm(P) - \\ & B_s^\pm(P) \left\{ 1 - \frac{1}{1+S_1} \left[\frac{1}{3} + (J-1)\varphi_2(J) - (J+1)\varphi_2(J-1) \right] \right\} & \text{für } {}^3\Pi_1, \\ B_{3II}(P) &= \frac{1}{1-S_0} B_s^\pm(P); & C_{3II}(P) &= C_s^\pm(P) - \\ & B_s^\pm(P) \left\{ 1 - \frac{1}{1-S_0} \left[\frac{1}{3} - (J-1)u^+(J) - (J+1)u^+(J-1) \right] \right\} & \text{für } {}^3\Pi_0. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Die obigen Formeln enthalten ausser den zu bestimmenden Konstanten B_{3II} , C_{3II} des störenden Termes auch den Kopplungsparameter Y ; diese drei unbekannten Grössen können aus den sechs Gl.-en (17) bzw. (19) mit Hilfe von Ausgleichungsrechnung ohne Schwierigkeit bestimmt werden [3], [4].

Die Gl.-en (17) und (19) vereinfachen sich wesentlich im *Hundschen Falle a*. Wenn nämlich $Y \gg J$, erhalten wir aus (17) und (19):

$$\left. \begin{aligned} B_{3II}(Q) &= B_s(Q); & C_{3II}(Q) &= C_s(Q) - B_s(Q) \quad (Y-2) & \text{für } {}^3\Pi_2, \\ B_{3II}(Q) &= B_s(Q); & C_{3II}(Q) &= C_s(Q) - 2B_s(Q) & \text{für } {}^3\Pi_1, \\ B_{3II}(Q) &= B_s(Q); & C_{3II}(Q) &= C_s(Q) + B_s(Q) \quad (Y-2) & \text{für } {}^3\Pi_0, \\ B_{3II}(P) &= B_s^\pm(P); & C_{3II}(P) &= C_s^\pm(P) - B_s^\pm(P) \quad (Y-2) & \text{für } {}^3\Pi_2, \\ B_{3II}(P) &= B_s^\pm(P); & C_{3II}(P) &= C_s^\pm(P) - 2B_s^\pm(P) & \text{für } {}^3\Pi_1, \\ B_{3II}(P) &= B_s^\pm(P); & C_{3II}(P) &= C_s^\pm(P) + B_s^\pm(P) \quad (Y-2) & \text{für } {}^3\Pi_0. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Ist der gestörte Zustand ein ${}^1\Sigma$ Term, dieser wird — wie aus dem vorangehenden Artikel hervorgeht [6] — von der Komponente ${}^3\Pi_2(a)$ nicht gestört; in solchem Fall haben natürlich die ersten Gl.-en von (20) und (21) keinen Sinn.

Im Hundschen Fall b , d. h. wenn $Y \ll J$, erhalten wir ebenfalls einfachere Ausdrücke, nämlich:

$$\left. \begin{aligned} B_{3II}(Q) &= \frac{J}{J+1} B_s(Q); C_{3II}(Q) = C_s(Q) - B_s(Q) \left[J + \frac{1}{J+1} \right] \text{ für } K=J+1, \\ B_{3II}(Q) &= B_s(Q); C_{3II}(Q) = C_s(Q) \text{ für } K=J, \\ B_{3II}(Q) &= \frac{J}{J-1} B_s(Q); C_{3II}(Q) = C_s(Q) + B_s(Q) \left[J + \frac{1}{J-1} \right] \text{ für } K=J-1. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

$$\left. \begin{aligned} B_{3II}(P) &= \frac{J}{J+1} B_s^-(P); C_{3II}(P) = C_s^+(P) - B_s^-(P) \left[J + \frac{1}{J+1} \right] \text{ für } K=J+1, \\ B_{3II}(P) &= B_s^\pm(P); C_{3II}(P) = C_s^\pm(P) \text{ für } K=J, \\ B_{3II}(P) &= \frac{J}{J-1} B_s^\pm(P); C_{3II}(P) = C_s^\pm(P) + B_s^\pm(P) \left[J + \frac{1}{J-1} \right] \text{ für } K=J-1. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Praktische Anwendungen der hier abgeleiteten Methode findet man bei der Deutung der Störungen im Bariumoxydspektrum. [4]

LITERATUR

1. I. Kovács, ZS. f. Phys. **106**, 431, 1937.
2. R. Schmid u. L. Gerö, ZS. f. Phys. **93**, 656, 1935. L. Gerö, ZS. f. Phys. **93**, 669, 1935.
3. S. M. Nauté, H. Verleger, Phys. Rev. **80**, 432, 1950.
4. R. F. Barrow, A. Lagerqvist, E. Lind, Proc. Phys. Soc. A **63**, 1132, 1950.
5. I. Kovács u. A. Lagerqvist, Arkiv för Fysik, **2**, 411, 1950. Journ. Chem. Phys. **18**, 1683, 1950.
6. A. Budó u. I. Kovács, ZS. f. Phys. **109**, 393, 1938. **111**, 633, 1939.
7. A. Budó u. I. Kovács, Act. Phys. Hung. **1**, 84, 1951.
8. R. Schlapp, Phys. Rev. **39**, 805, 1932.
9. A. Budó, ZS. f. Phys. **96**, 219, 1935.

ОБОЩЕННЫЙ СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОСТОЯННЫХ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ТЕРМАХ ДАЮЩИХ ВОЗМУЩЕНИЯ, НА ОСНОВАНИИ ДАННЫХ ВОЗМУЩЕНИЯ (И. Ковач)

(Резюме)

Один из трех раньше заданных приемов, вычисления постоянных в молекулярных термах дающих возмущения, мы распространяли на все такие (синглетные и триплетные) возмущения, которые практически встречаются при синглетных переходах. Наш метод основан на наблюдении по крайней мере двух сверхкомплектных пар линий вблизи места возмущения, и приводит к непосредственно применимым формулам.

LETTERS TO THE EDITOR

SOME NOTES ON THE QUANTIZATION OF REAL FIELDS

(Received: 28. IV. 1950.)

According to the fundamental assumption of the first quantization (quantization of *one* particle) differential and matrix operators are corresponding to every physical quantity. We apply these to the state functions describing the examined corpuscle. If the corpuscle is in an eigenstate the eigenvalues obtained will give the momentary values of energy, momentum etc. for one particle. This method was succesful in case of electrons (fine structure from Dirac equation), nucleons (energy levels of the nucleus) and it is applicable also to the meson described by complex functions (Kemmer equation in dynamical form[1]). But one cannot determine the energy or momentum values of a *single* photon by this method. In general: the first quantization is inapplicable in case of real state functions (for instance electromagnetic potentials), as we shall see below.

Let us examine the eigenvalue equation of a component of the momentum and orbital angular momentum:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \kappa \psi \quad (1)$$

$$\frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \lambda \psi \quad (2)$$

(The eigenvalues κ , λ are at any rate real.) If we should assume ψ as real, the left side of the equations would turn out to be imaginary and the right side to be a real expression, a result which is an absurdity. The case is similar with the other physical quantities. If we apply the dynamical equation

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + H\psi = 0$$

to an eigenfunction belonging to a real E energy eigenvalue of the Hamiltonian H , we obtain the equation

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -E\psi$$

Again ψ cannot be a real value, because that would lead to the same difficulty as above.

We define the total angular momentum as $\frac{\hbar}{i}$ times the infinitesimal rotation operator in the ψ -field[2]. If one rotates the coordinate system around the axes x_1, x_2, x_3 by angles $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ respectively, the wave function will be transformed into $\psi'(a_1, a_2, a_3)$. Making use of this notation we may write the eigenvalue equation of the total angular momentum as follows:

$$M_k \psi = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi'}{\partial \alpha} \right)_{\alpha=0} = \mu \psi \quad (3)$$

Here the angular momentum eigenvalue μ and the angles α_k being real the wave function ψ (and ψ' at the same time) cannot be considered as a real one because of the reason mentioned above. The spin is the difference between the total and the orbital angular momentum. Subtracting (2) from (3) we get the result that the spin cannot have real eigenvalues either.

From the above considerations we may see, that the *physical quantities in question have no real eigenfunctions*. We will not assume, that a real field can never be in an eigenstate (as for instance Dirac does[3]). One may save the situation by forming complex functions out of the real ones through contracting. Then the quantization of a single particle can be employed [4, 5]. (The appearance of complex functions does not mean the appearance of any electric charge [6], because the possibility of defining a current vector depends on the existence of the gauge invariance of first kind and this cannot be the case now [7].)

If one refuses to contract the state functions, then in case of neutral fields we cannot make use of the first quantization, which, however, has been used successfully in case of charged corpuscles. It is only the second quantization, the quantization of the *field* that can be applied to real wave functions. This recognition supports the view of N. Kemmer[1]. In his opinion a *corpuscle* is described by a *complex* state function. In case of electrically neutral entities described by *real* functions the *field-aspect* is primary. The quantization of the field may certainly lead to quantization of energy and other quantities, but nothing supports the assumption that such quanta could be localized or that they would have any corpuscular nature whatsoever. This view is supported by the fact, that neutral fields have not been observed as particles.¹ The photon must be looked at as an oscillator distributed in the whole space rather than as a particle[9]. Nor can the energy carried by the »gravitation waves« be localized in space[10], nor is there any indication that the neutrino should

¹ Through its magnetic momentum the neutron is in direct interaction with the electromagnetic field. We may subject the electromagnetic potentials to a gauge transformation of second kind, but then we must apply a gauge transformation of first kind to the state function of the neutron, so that the equation describing the interaction should remain invariant[8]. By this one may see, that the state function of the neutron must necessarily be complex. — I thank my colleague P. Roman, for having called my attention to this fact.

be of more corpuscular character, than the photon. The same may be said of the neutral mesons too. We must assume neutral mesons in view of the charge independence of nuclear forces [11], and indirect measurements give indications about the appearance of neutral mesons in energetic nuclear collisions [12]. It is at present uncertain whether neutral mesons are waves or corpuscles and therefore we do not know whether they should be described by real or complex wave functions. M. Moller wrote already in 1939 that the neutral meson field can also be considered as the superposition of oscillators to which quantum character is given only by the quantization of the field [13].

G. Marx

Department of Theoretical Physics
of the University in Budapest.

REFERENCES

1. N. Kemmer, Proc. Roy. Soc. A. **173**, p. 91. (1939)
2. H. Weyl: Gruppentheorie und Quantenmechanik p. 157. (1928)
3. P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A. **180**, p. 15. (1942)
4. G. Rumer, Zeitschrift für Physik **65**, p. 244. (1930)
5. G. Molière, Annalen der Physik VI. **6**, p. 146. (1949)
6. G. Wentzel: Quantum Theory of Fields p. 14. (1949)
7. G. Marx, Hungarica Acta Physica I. No. 6. (1949)
8. A. Sommerfeld: Atombau und Spektrallinien II. p. 722. (1939)
9. W. Heiler: The Quantum Theory of Radiation p. 63. (1936)
10. A. Einstein, Berliner Berichte (1918) p. 448.
11. L. Rosenfeld; Nuclear Forces p. 162. (1948)
12. Bjorkland et al. Physical Review **77**, p. 213. (1950)
13. M. Moller, Nature **142**, p. 290. (1939)

A NEW STATISTICAL THEORY OF ATOMIC NUCLEI

By

P. ROMÁN

DEPARTMENT FOR THEORETICAL PHYSICS, UNIVERSITY OF BUDAPEST.

(Presented by K. Novobátzky. — Received 17. V. 1950.)

Let us assume the internucleonic field of force to be a static, central, scalar meson field. We imagine the nucleons to move statistically distributed in this field. After getting an approximate solution of the potential equation, we can calculate the binding energy of atomic nuclei. The energy expression thus obtained also automatically gives the surface-tension of the nuclei. The numerical results, — taking into account the Coulomb energy too, — agree surprisingly well with the experience.

Majorana [1] was the first, who studied the statistical theory of atomic nuclei. The starting point of his theory is, that, assuming the nucleons independent of each other, the state-function of the whole nucleus can be fitted — in accordance with the *Hartree* approximation — as the product of the individual state-functions of the single nucleons.

On the other hand, the latter ones are obtained by dividing the nucleus into small subspaces and assuming the nucleon state-function to be a plane wave in each subspace. The minimal wave length occurring in the subspace is determined by the allowed maximal particle impulse, given by the *Fermi-statistics*, if we consider the nucleus as a highly degenerate Fermi-gas.

Thereafter, fixing the force of interaction between the nucleons in some explicit form, we can form the quantum theoretical expectation value of the energy. So as to obtain the best results, the two constants of the law of force (essentially the width and depth of the potential valley) are considered as variational parameters. However, after performing the calculations, it turned out that the binding energies obtained cover only the fourth part of the observed values. Taking also the Coulomb repulsion and the surface tension of the nuclei into account, the result becomes even worse. The only possibility is to choose the constants of every nucleus in an *ad hoc* way, but these *ad hoc* values are highly improbable. Summing up, *Bethe* [2] states, that the statistical model is fully inadequate for calculating binding energies, and its only advantage is to give several qualitative hints.

In what follows we shall develop a statistical model of nuclei based on an entirely different concept, which will be a so-called »non-quantum theoretical« picture of the atomic nucleus.¹

Let the field of force between the nucleons be a static and central *scalar meson field*. Let us imagine, that the nucleons fill out the available space in the nucleus in some »pulverized« way, similar to the electron distribution in the *Thomas-Fermi* theory of atoms.

Under these assumptions the potential equation reads :

$$\Delta V - \mu^2 V = -4\pi\rho = 4\pi ng \quad (1)$$

where V is the potential, ρ the density of mesonic charge, n the nucleon density itself, and g the mesonic charge attached to *one* nucleon, the sign of which being chosen — for the sake of convenience — to be negative, finally

$$\mu = \frac{2\pi M_m c}{h}, \text{ where } M_m \text{ means the mesonic mass.}$$

The nucleon density n may now be determined in, for instance, an analogue way to the *Thomas—Fermi* procedure, calculated from the highest allowed momentum. As $n = \alpha V^{3/2}$, we obtain, substituting this in the right side of (1) a differential equation for V .² However, even an approximative solution of this equation, which is of a still more complicated structure than the well known *Thomas—Fermi* equation, meets with so to say inevitable mathematical difficulties, considering also the very complicated boundary conditions (see below). Therefore, we have to simplify the problem by some suitable physical argument.

As a simplification of this kind we may make use of the well-known fact, that the density of »nuclear matter« is approximately constant for every nucleus. Further, the radius of the nucleus is proportional to the cube root of the atomic number :

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad (2)$$

therefore the nucleon density in the nucleus is :

$$n = \frac{A}{\frac{4\pi}{3} R^3} = \frac{3}{4\pi r_0^3}. \quad (3)$$

¹ According to this picture we completely neglect the zero point kinetic energy of the nucleons.

² During the second revision of the printed manuscript, L. M. Yang (Edinburgh) kindly directed my attention to a paper of *Ivanenko and Rodichev* (Dokladi Akad. Nauk. SSSR. 70. 605.) who used this method to calculate the »magic numbers« of nuclei.

This experimental fact is the consequence of the saturated character of nuclear forces [3] and thus it is compatible with our meson field concept.

Equ. (1) now becomes :

$$\Delta V - \mu^2 V = \frac{3g}{r_0^3}. \quad (4)$$

As we supposed only central forces, ΔV is in polar coordinates :

$$\Delta V = \frac{d^2 V}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dV}{dr}.$$

Further, introducing in place of V the new function φ , defined by

$$\varphi = rV \quad (4a)$$

we obtain :

$$\varphi'' - \mu^2 \varphi = \frac{3}{r_0^3} gr. \quad (5)$$

Naturally, this equation is only valid *inside* the nucleus, that is, in the region $r \leq R$. Outside the nucleus the density is zero¹, therefore in this region the potential multiplied by r (which quantity we denote by Ψ , to distinguish it from φ) will satisfy :

$$\Psi'' - \mu^2 \Psi = 0. \quad (5a)$$

The general solution of (5) is :

$$\varphi = -\frac{3g}{r_0^3 \mu^3} r + ae^{\mu r} + be^{-\mu r}. \quad (6)$$

The corresponding one of (5a) :

$$\Psi = ce^{\mu r} + de^{-\mu r}. \quad (7)$$

The following boundary conditions serve to fix the four constants occurring (a, b, c, d) :

1.) The potential has to vanish in infinity. This renders immediately :

$$c = 0. \quad (I)$$

2.) Because of the central symmetry of the field, the force has to disappear at the center of the nucleus. With other words, the gradient of the potential has to vanish :

$$\left(\frac{\partial V}{\partial r} \right)_{r=0} = 0. \quad (8)$$

¹ This is not in contradiction to our statistical point of view, since in first approximation outside the nucleus $V \sim e^{-\mu r}$, and so $n \sim (e^{-\mu r})^{1/2}$ which is negligible.

Using (6) and (4a), we obtain :

$$\left\{ a \frac{\mu r e^{\mu r} - e^{\mu r}}{r^2} + b \frac{-\mu r e^{-\mu r} - e^{-\mu r}}{r^2} \right\}_{r=0} = 0$$

This is satisfied, if

$$b = -a. \quad (\text{II})$$

Thus (6) gives :

$$\varphi = -\frac{3g}{r_0^3 \mu^2} r + 2a \operatorname{sh} \mu r. \quad (6a)$$

3.) The potential changes continuously on the boundary of the nucleus : $\varphi(R) = \Psi(R)$, that is

$$-\frac{3g}{r_0^3 \mu^2} R + 2a \operatorname{sh} \mu R = d e^{-\mu R}. \quad (9)$$

4.) The gradient of the potential also changes continuously on the boundary of the nucleus : $\left(\frac{\partial V_I}{\partial r} \right)_R = \left(\frac{\partial V_{II}}{\partial r} \right)_R$, from which follows :

$$-\frac{1}{R^2} \varphi(R) + \frac{1}{R} \varphi'(R) = -\frac{1}{R^2} \Psi(R) + \frac{1}{R} \Psi'(R)$$

and that means, considering our previous boundary condition,

$$\varphi'(R) = \Psi'(R),$$

that is

$$-\frac{3g}{r_0^3 \mu^2} + 2a\mu \operatorname{ch} \mu R = -d\mu e^{-\mu R}. \quad (10)$$

Multiplying (9) by μ and adding it to (10) :

$$a = \frac{1}{2} \frac{3g}{r_0^3 \mu^2} \frac{1}{\operatorname{sh} \mu R + \operatorname{ch} \mu R} \left(R + \frac{1}{\mu} \right). \quad (\text{III})$$

So we obtain finally, substituting (III) into (6a) :

$$\varphi = \frac{3g}{r_0^3 \mu^2} \left\{ -r + \left(R + \frac{1}{\mu} \right) \frac{\operatorname{sh} \mu r}{\operatorname{sh} \mu R + \operatorname{ch} \mu R} \right\}, \quad (11)$$

and thus our main problem is already solved.¹

As an application, let us make use of our result to calculate the *binding energies of atomic nuclei*.

¹ Note added in proof: A similar result may be found in Dänzer, Einf. in die theorie Kernphysik, 1949.

The energy of the nucleus is evidently :

$$E = \frac{1}{2} \int \varrho V d\tau, \quad (12)$$

where the integral should be extended over the entire nucleus. Using again ϱ instead of V and introducing instead of the density of mesonic charge the nucleon density itself, taking the latter from (3), we get step by step :

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} g n \int \frac{1}{r} \varphi(r) d\tau = \frac{3g}{8\pi r_0^3} \int_0^R \frac{1}{r} \varphi(r) 4\pi r^2 dr = \\ &= \frac{3g}{2r_0^3} \int_0^R r \varphi dr. \end{aligned} \quad (12a)$$

Performing the integration :

$$\int_0^R r \varphi dr = \frac{3g}{r_0^3 \mu^2} \left\{ -\frac{R^3}{3} + \frac{\left(R + \frac{1}{\mu}\right)}{\text{sh}\mu R + \text{ch}\mu R} \left(\frac{R}{\mu} \text{ch}\mu R - \frac{1}{\mu^2} \text{sh}\mu R \right) \right\}. \quad (13)$$

Substituting this into (12a) :

$$\begin{aligned} E &= \frac{3g^2}{2\mu^2 r_0^3} \left\{ -\frac{R^3}{r_0^3} + \frac{3}{r_0^3 \mu^2} \frac{\left(R + \frac{1}{\mu}\right)}{\text{sh}\mu R + \text{ch}\mu R} (R\mu \text{ch}\mu R - \text{sh}\mu R) \right\} = \\ &= \frac{3g^2}{2\mu^2 r_0^3} \left\{ -\frac{R^3}{r_0^3} + \frac{3}{\text{sh}\mu R + \text{ch}\mu R} \left(\frac{R^3}{r_0^3 \mu} \text{ch}\mu R - R \frac{\text{sh}\mu R}{r_0^3 \mu^2} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + R \frac{\text{ch}\mu R}{r_0^3 \mu^2} - \frac{\text{sh}\mu R}{r_0^3 \mu^3} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Noting, that even in the case of the lightest nuclei considered, $\text{sh} \mu R \approx \text{ch} \mu R$, and introducing, — for the sake of convenience, — the abbreviation

$$C = \frac{3g^2}{2\mu^2 r_0^3} \quad (15)$$

we obtain :

$$E = C \left\{ -\frac{R^3}{r_0^3} + \frac{3}{2} \frac{R^2}{r_0^3 \mu} - \frac{3}{2} \frac{1}{r_0^3 \mu^3} \right\}. \quad (16)$$

Finally, using the atomic number instead of the nuclear radius :

$$E = C \left\{ -A + \frac{3}{2r_0\mu} A^{2/3} - \frac{3}{2r_0^3\mu^3} \right\}. \quad (17)$$

The illustrative interpretation of our result is in complete harmony with our knowledge concerning atomic nuclei. The first term, being proportional to the atomic number, gives the so called volume-energy of the nucleus. The second term, which is proportional to $A^{2/3}$, that is to R^2 , expresses the surface energy of the nucleus, which is proportional to the surface of the nucleus and diminishes the volume energy. We want to mention, that, in case of the statistical nuclear models of Majorana and Wigner, this term may only in an *artificial* way be taken into account, whereas, in case of the present model, it is a straightforward consequence of our primary concept. — The third term is a very small correction term, having no direct physical meaning, the effect of which is to diminish the surface-tension by a small amount.¹

So as to take the Coulomb repulsion between protons, which we have hitherto neglected, into account, we imagine the electric charge of the protons in first approximation to be distributed homogeneously in the nucleus. Then the Coulomb energy of a nucleus with the charge number Z and atomic number A will be :

$$E_c = \frac{3}{5} \frac{e^2}{R} Z^2 = \frac{3}{5} \frac{e^2}{r_0} \frac{Z^2}{A^{1/2}}. \quad (18)$$

In reality the protons naturally will tend towards the boundary of the nucleus ; even more, the neutron density will be also somewhat higher in the neighbourhood of the surface of the nucleus. But *Feenberg* [4] has shown, that these deviations are relatively small, and practically do not alter the binding energy.

Now, adding the Coulomb energy (18), which diminishes the binding energy, to (17), we get a formula for the total binding energy, which, in case of light and medium weight nuclei, gives numerical results in good agreement with the experimental results. However, in case of heavier nuclei there are some deviations. These are caused by the fact, that in heavier nuclei the connection between nuclear radius and mass number, given by (2) is no longer valid [5]. First, the slow increasing of the relative neutron excess leads to a weaker bond and so to a looser construction. On the other hand, the decreasing of the relative importance of the surface tension has the same result. Lastly, the steadily increasing Coulomb repulsion results also in the »blowing up« of the nucleus.

Because of these considerations, we have instead of (2) to use the more complicated formula (19) given below, in accordance with the usual procedure in the literature [2], [6], [7] :

$$R = r_0 (1 + \delta \Theta^2) A^{1/2}, \quad (19)$$

¹ This term arises from having neglected the density outside the nucleus.

here

$$\Theta = \frac{N - Z}{A} \quad (19a)$$

the relative neutron excess, and the value of the coefficient δ is given by experience. Especially, taking also in account the new values of nuclear radii for heavier atoms, according to *Preston's* [7] calculations, we have to use the value $\delta \approx 0,8$, which is also in very good agreement with *Present's* [5] more complicated estimates. Anyhow, the value of the entire correction factor changes only by a few percent from the lightest to the heaviest nuclei, and thus the value of δ is of minor interest.

Further, the nucleon density will not any more be given by (3), but, according to (19), by:

$$n = \frac{3}{4\pi r_0^3 (1 + \delta\Theta^2)}. \quad (20)$$

Repeating our calculations from the beginning with these corrected values, in other words, substituting in the final result everywhere r_0 by $r_0(1 + \delta\Theta^2)$, we obtain for the binding energy instead of (17):

$$E = \frac{C}{x^3} \left\{ -A + \frac{3}{2\mu r_0} \frac{1}{x} A^{2/3} - \frac{3}{2r_0^3 \mu^3} \frac{1}{x^3} \right\}, \quad (21)$$

where we used for the sake of brevity the notation

$$x = (1 + \delta\Theta^2). \quad (21a)$$

Of course, a similar correction has to be carried out in the calculation of the Coulomb energy. Summing up, the *total* binding energy of the nucleus will be:

$$E_T = \frac{C}{x^3} \left\{ -A + \frac{3}{2\mu r_0} \frac{1}{x} A^{2/3} - \frac{3}{2\mu^3 r_0^3} \frac{1}{x^3} \right\} + \frac{3}{5} \frac{e^2}{r_0} \frac{1}{x} \frac{Z^2}{A^{1/3}}. \quad (25)$$

The numerical results obtained with the help of this formula are collected in the table below. The columns of it contain, one after the other, the symbol, atomic number, charge number of the nucleus considered, its total binding energy evaluated on the basis of (25), the corresponding experimental value (taken from the table contained in *Rosenfeld's* book [3]), and finally the deviation between the two last data, expressed in percentages.

The numerical constants used for the calculations were chosen as follows: The meson-mass was taken to be $330 m_e$, which seems to be a good value for the π -mesons. Whith this we obtain $\mu = 8,5 \cdot 10^{12}$. The mesonic charge g was taken to be $g \approx 4e$, a value often used in the corresponding literature (see for instance: *Yukawa* [8]). The most probable value of r_0 is, according to *Rosenfeld* [3], $r_0 = 1,42 \cdot 10^{-13}$. With these data we obtain: $C = 16$ MeV.

TABLE

	A	Z	$ E_T $ MeV	E_T^{exp} MeV	Dev. %
C	13	6	102.0	96.66	+ 5.5
N	14	7	109.3	104.26	+ 4.8
N	15	7	120.1	115.06	+ 4.4
Ne	20	10	164.8	159.98	+ 3.0
Al	27	13	232.2	224.5	+ 3.4
S	32	16	276.6	272.12	+ 1.6
Ca	42	20	376	360.91	+ 4.2
Fe	56	26	512.2	486.52	+ 5.3
Mo	97	42	877	834.8	+ 5.1
Sn	124	50	1090	1046.0	+ 4.2
Gd	160	64	1379	1312.3	+ 5.0
Pt	196	78	1632	1551.0	+ 5.2
Em	220	86	1790	1687.25	+ 6.1
U	238	92	1924	1790.0	+ 7.5

Summing up the results we can say, that our model is appropriate to calculate binding energies. The results are satisfying not only from the theoretical point of view, considering the form of the energy expression, but are also numerically very good, even in case of the lightest nuclei. The somewhat large deviations shown by the heaviest nuclei may be explained by the fact, that in those nuclei we may not count any more with a homogen density distribution within the nucleus, on which our simplifying assumption was based.

Finally, I would like to thank Prof. K. Novobátzky for his encouragement and interest in my work.

REFERENCES

1. E. Majorana, Zs. f. Phys., **82**, 137 (1933).
2. H. Bethe, R. Bacher, Rev. Mod. Phys., **8**, 82 (1936).
3. L. Rosenfeld, Nuclear Forces, 1948, pp. 24—26., 23, 242.
1. E. Feenberg, Phys. Rev., **59**, 593 (1941).
5. R. Present, Phys. Rev., **60**, 28 (1941).
6. K. J. Le Couteur, Proc. Phys. Soc. A., **63**, 259 (1950).
7. M. Preston, Phys. Rev., **71**, 865 (1947).
8. H. Yukawa, Proc. Math. Phys. Soc. Jap., **17**, 48 (1935).

НОВАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АТОМНОГО ЯДРА.

П. Роман.

(Резюме)

Междуонуклонное силовое поле выбирается статическим центральным скалярным мезонным полем. Нуклеоны в силовом поле предполагаются статистически распределенными. После приближенного решения потенциального уравнения делается возможное вычисление энергии связи атомных ядер. Полученное таким образом выражение для энергии автоматически даёт отчёт и о поверхностном натяжении атомных ядер. Численные итоги принимают во внимание и кулоновую энергию в поразительно хорошем согласии с экспериментальными данными.

LUMINESCENCE PHENOMENA IN WILLEMITE PHOSPHORS

By

E. NAGY

RESEARCH LABORATORY FOR TELECOMMUNICATION, BUDAPEST

(Presented by P. Gombás. — Received 2. VIII. 1950.)

The author gives a brief account of some recent progress in the investigation of fluorescence. Data are given on the band complex of willemite fluorescence and phosphorescence at several temperatures and with varying manganese concentrations. The dielectric behaviour of these substances was also investigated and found to be closely connected with the fluorescence. These results are discussed in the light of the modern theory of solids and some interesting conclusions are drawn.

In the present paper the author tries to sum up the researches on luminescence conducted in the Research Laboratory for Telecommunication (formerly Tungsram Research Laboratories). The systematic investigations began as early as 1942, and from that date several publications have appeared in various periodicals. As experiments have been concluded, and some problems settled, it seems to us appropriate to sum up and discuss the investigations already carried out, to assess their merits and faults, and to examine, how far we have gone towards the ultimate understanding of the luminescent phenomenon in general, and of the selected class of luminescent materials in particular. These considerations will show, that still further experiments are necessary for a unified — and to our present knowledge — complete description of the luminescent process. For even a partial achievement of our object new experimental arrangements and new instruments were necessary, which were fully described in the previous publications.

Zinc silicate activated with manganese was investigated first, as it is a phosphor, which is theoretically interesting and can be easily reproduced. *Szigeti* and *Nagy* [1], [2], [3] have shown, that the emission spectrum of willemite consists of several bands, each with a maximum at 2,48, 2,35, 2,27, 2,17, and 2,05 electron volts. (Figs. 1,2.) The last named four bands were later found independently by *Butler* [4] at the same positions. *Brinkman* and *Vlam* [5], [6] have also ascertained, that the willemite spectrum is not a single band and have analysed it into two components. Although the position

of their main band coincides with ours, the bands at 2,27 and 2,17 electron volts are not resolved by them, owing very probably to the great band-width of their monochromator.

These observations of course do not decisively prove the validity and the uniqueness of our separation into components. Two other experimental facts

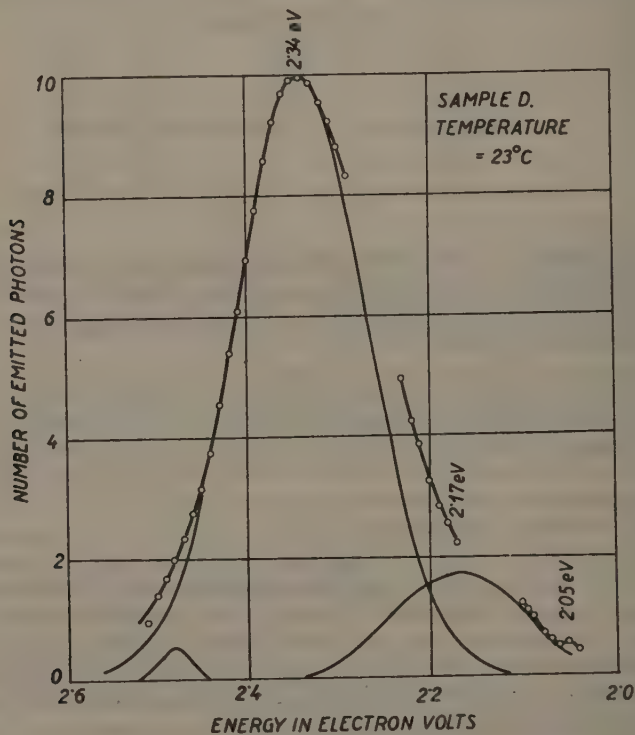


Fig. 1. Emission spectrum of willemite (1.2% Mn) at 23° C

ultimately decide in favour of our assignment of component bands in the willemite spectrum.

If an emission spectrum consists of a number of bands, it may happen that the decay constants of the individual bands are different. When this is the case, then the spectrum under equilibrium excitation, and in various

tages of the phosphorescent decay looks different; during the decay the bands with shorter lifetime disappear prior to the bands of comparatively longer lifetime. Such experiments were carried out by *Studer and Rosenbaum* [7], who photographed the spectrum of the zinc beryllium silicate in decay for

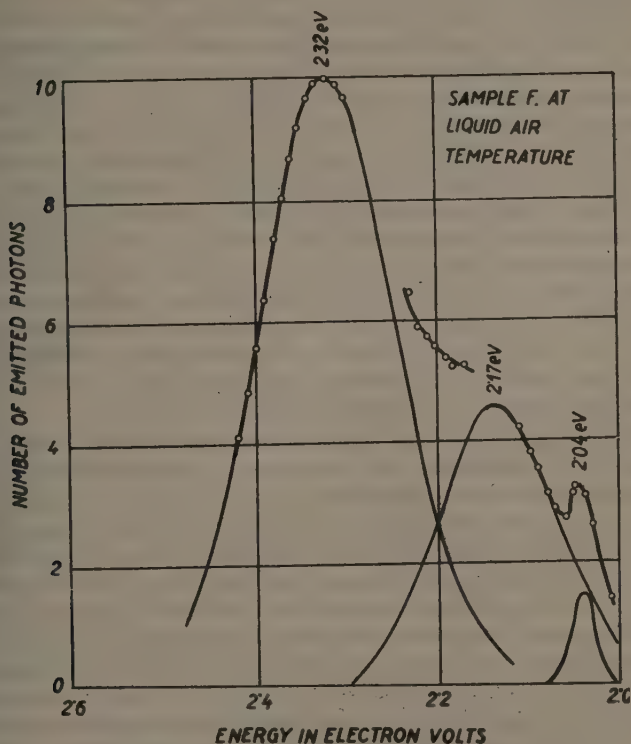


Fig. 2. Emission spectrum of willemite (6% Mn) at -180°C

seven hours and found that the spectrum in equilibrium and in the decay is the same. Studer and Rosenbaum's result was later criticised by *Schulman* [8] who found by direct measurement (with an experimental arrangement identical with our own) a very marked difference between the spectrum in equilibrium excitation and decay. We have carried out the same experiment on several samples of willemite and found, that the subbands disappeared almost completely after a decay of 3 or 4 milliseconds [9]. These subbands were identified

as the components which appear in the decay curve of willemites. As *Gergely* found recently [10], the phosphorescence of willemite, although monomolecular, cannot be described by a single exponential, but consists of three components, each having a different decay constant, each step in the phosphorescence decay corresponding to a single band in the emission spectrum.

The other experimental proof is furnished by *Shrader's* results [11]. He has found, that specially prepared amorphous β -willemite samples show these subbands clearly resolved at elevated temperatures. Because of the tendency of the β -willemite phase to be stable in lattices containing silica in excess of the stoichiometric orthosilicate proportions (our preparations contained appr. 0,9 mole excess silica), we are of the opinion that the bands at 2,27 and 2,17 electron volts are caused by the β -willemite phase present. The checking of this assumption is at present in progress.

The observations of *Shrader* and *Nagy* remove any doubt as to the soundness of the separation into components. This means, that the willemite emission spectrum, which was described in the literature as a »slightly asymmetric single band« has a great deal of important complexities. The fact that it was first observed by us in the year 1946 and is as yet not entirely elucidated, shows that the great wealth of physical data on luminescence needs careful re-examining and checking with more modern and exact instruments.

The next question, which arises in connection with the band-system is the shape of the individual band. According to quantum mechanics, it is a fundamental law that the emission and absorption of light takes place in distinct quanta, and that the energy difference between the levels taking part in the process is absorbed or radiated obeying Einstein's relation. When the ground or the excited states, or both, broaden into bands, the transition probability depends on the distribution of the levels in both bands, and on the shape of a single transition. This means, that emission or absorption are to be plotted in terms of energy or frequency, and not in terms of the wavelength, as is sometimes done. Accepting therefore the energy as the independent variable, there remains only the selection of an adequate ordinate, in which to represent the spectra. This is done most naturally in terms of the numbers of photons (intensity divided by $h\nu$). For line spectra, the width of which is negligible compared to that of fluorescence spectra, it is of course the same, whether the spectra are plotted in photon numbers or in intensity. In fluorescent spectra, however, this difference may alter the spectra by as much as 30%, and if one wishes to study a fluorescent spectrum as a sum of radiative transitions, where either the ground or excited state, or both, broaden into continuous bands, one has to plot the photon numbers against the frequency. In such a representation each single band must be strictly symmetrical. This was shown for the willemites only in the emission spectra observed during

phosphorescence, when the asymmetry of the yellow side disappeared and an entirely symmetrical spectrum resulted [9]. (Fig. 3.)

The shape of an individual emission band is supposed to be a Gaussian error-curve. This is the simplest equation, with which to describe the spectrum.

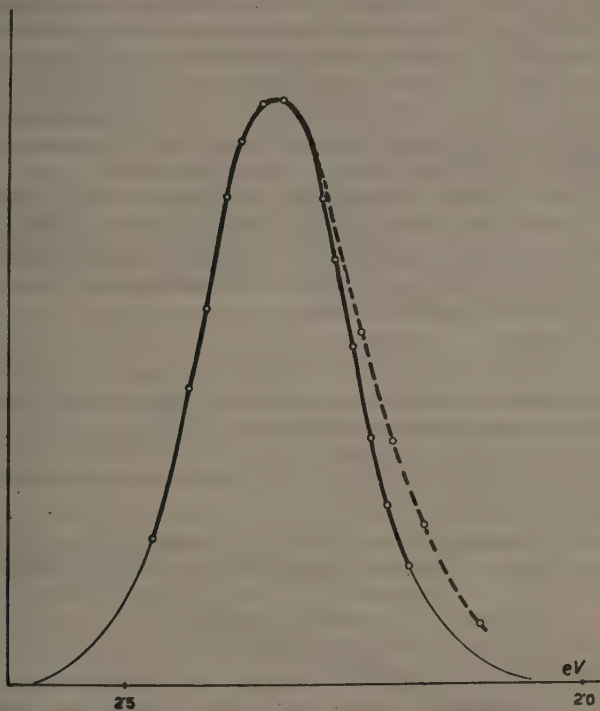


Fig. 3. Fluorescence (dotted line) and phosphorescence (full line) spectrum of a willemite.

We have attempted to offer an explanation of this fact [2] by assuming, that the observed spectrum-band is the superposition of a great number of individual transitions, each having the same dispersion-curve. The ground and excited states of these transitions are contained in bands, which for the sake of easier calculation were supposed to be of equal width and equal level-density. This explanation, although fundamentally correct, does not seem to be complete, as our calculation may furnish spectra of other shapes as well; thus one has still to look for another, hitherto hidden parameter, which would allow the

existence of spectra of Gaussian shape only and which would exclude all others. The explanation of the Gaussian spectrum shape therefore needs further investigation, especially in regard to the distribution of the states in those bands of the activator or host lattice, between which the emission takes place. Butler [12] has attempted to derive this form by assuming that the temperature induced vibrations of the centre in the ground state give a statistical distribution of its position around a most probable value, and further that the potential curve of the excited state (energy versus some mean interatomic distance) is linear in the corresponding region. Regarding the great width of some fluorescent emission spectra (spectra as broad as 1 electron volt are to be found), the second assumption is hardly justifiable.

The willemite bands suitable for a closer examination (the main band at 2.35 e. v. and a subband at 2.17 e. v.) show a broadening with increasing temperature. Any plausible extrapolation to absolute zero temperature always leads to a finite width there. The temperature dependence of the band half-width, β , can be written in the form :

$$\beta = \beta_0 + cT^n, \quad (1)$$

where the exponent n is in the neighbourhood of unity. It can have a value between 1 and appr. 1.5, but the former is the more probable. (Fig. 4.)

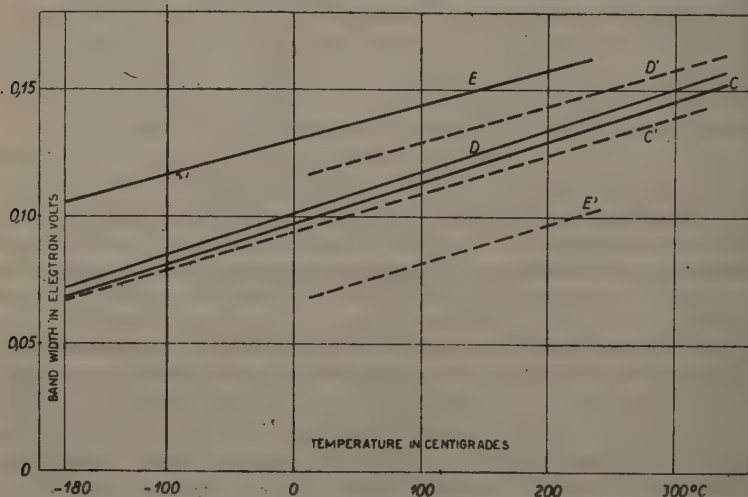


Fig. 4. Temperature dependence of the bandwidth for several willemites. Main band with full, subband at 2.17 ev with dotted line.

Exponents with a value of less than 1 are very improbable. Having a linear law, the numerical value for willemite is between $1,5k$ and $2k$, k denoting Boltzmann's constant.

The exact band-broadening and band-maximum displacement with increasing temperatures can furnish very valuable data on the variations of energy levels in solids caused by temperature. It is interesting to remark that this band-broadening ($1,5-2 kT$) does not seem to be contradictory to *Radkovsky's* [13] calculations on the broadening of the individual bands in the solids. Because the maximum displacement (if it does exist at all) is quite negligible relative to this band-broadening, *Radkovsky's* calculations prove that the luminescent transition does not take place between the ground and conduction bands of the zinc silicate lattice.

Apart from the significance of this linear law and its coefficient, another point worth considering may be that these linear laws run exactly parallel not only in case of the main bands of zinc silicates, but for the 2,17 e. v. bands too, showing that the relative contributions of main band and subbands to the total emission are insensitive to temperature. A contrary opinion was expressed by *Brinkman and Vlam* [5], [6], but this may be due to their omitting one of the subbands.

In the preceding text the bands of zinc silicates were all designated by their positions for the best fluorescing substance with appr. 1% Mn. The same structure (bands at 2,35, 2,27 and 2,17 e. v.) appears at all manganese concentrations, from traces up to 6%. This band-structure is slightly sensitive to manganese concentration, with increasing manganese concentration the bands steadily shift together towards the red, the total shift being for the above range 0,04 e. v.

The other bands, namely those at 2,48 e. v., and at 2,03 e. v. occur only under special conditions. The first is visible with small manganese concentrations at room temperature, the latter with high concentrations of manganese. This same band appears with a much greater amplitude in zinc-beryllium silicates; it is the main emission band of this compound.

Having thus obtained the emission spectra at different temperatures the area of each band was calculated, and was found to be constant up to a certain temperature, then to decrease rapidly according to the *Mott-Gurney* [14] formula:

$$I/I_0 = [1 + C \exp(-E/kT)]^{-1}, \quad (2)$$

The activation energies vary with the manganese concentration, the maximum occurring for the best samples. The same holds for constant $\propto C$.

Having found an exponential dependence here (previously thought to be caused only by the exponential increase of the probability of radiationless

transitions), one can try to measure other quantities, which also obey an exponential law and ask, whether these processes are in any way linked together. This reasoning has led us to investigate the electrical properties of fluorescent materials.

It is evident, and has also been realised in the course of the investigations, that owing to the microcrystalline structure of the available solid luminescent materials (1—20 microns), conductivity measurements with D. C. on a single crystal would be very difficult. The pressing of the powder into pellets, however, is not an operation, which can be easily reproduced, for non-ohmic effects (caused by crystal boundaries) and rectification can quite easily destroy the constancy of the results. Therefore, the investigations were carried out by measuring the dielectric losses. The frequency used was 20 Mc/sec. and the oscillator delivered 1 Volt. Although this rather low value makes the observations a little more difficult, the loss in range is amply rewarded, because at this voltage the boundary effects are excluded, for then the charge carriers are most probably confined to the same crystal grain and cannot move across crystal boundaries.

These dielectric loss measurements revealed two significant features [15], [2], [3]. First, that an appreciable dielectric loss can be observed on all zinc silicates of the most different compositions, firing temperatures during preparation and times of firing. This dielectric loss shows at room temperature a value calculated at a conductivity of $2-20 \cdot 10^{-8} \text{ ohm}^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Above a critical temperature the loss begins to rise exponentially. After subtracting its room temperature value from the total one, we find, that this variation is exponential within the limits of experimental accuracy. Moreover this exponent is, also within the limits of experimental accuracy, the same as that found for the light decrease caused by temperature.

$$\sigma = \sigma_0 + A \exp(-E/kT). \quad (3)$$

This statement applies similarly to all willemite hitherto investigated, and may be generally true for a much wider class of luminescent materials. It was observed e. g. that ZnS activated by silver or copper shows a marked dielectric loss without excitation. (Fig. 5.) The temperature dependence of the dielectric loss is exactly parallel with that of the light decrease, the activation energy, E , being for ZnS. Ag appr. 0.5 e. v., in accordance with the light-decrease measurements of our own, of Garlick and Gibson [16] and of Riehl [17].

These striking facts, which are of general interest call for an adequate explanation. One possible explanation would be the assumption of the appearance of new absorbing centres which would make possible a process competing with the luminescent centres proper. If these new centres contribute to the absorption of the exciting ultraviolet, then the material ought to have a tem-

temperature dependent absorption coefficient, whose increase must run parallel to that of the light decrease and the dielectric losses.

The absorption coefficient of a fluorescent powder, available only in powdered form, was measured recently by Bodó [18]. He has shown, that for

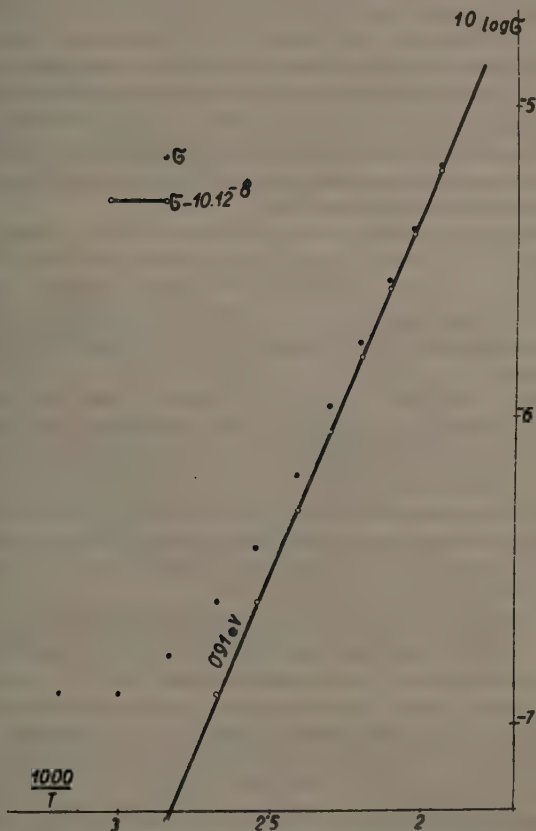


Fig. 5. Dielectric losses of ZnS activated by silver.

excitation with 2537 Å ultraviolet, the absorption caused by the lattice is negligible to that caused by the manganese, and the absorption is temperature independent for willemite. This experimental fact, therefore, excludes the

above possibility, showing that always the same proportion of the activator is excited, irrespective of temperature.

Supposing now — as the simplest model — that the level reached in excitation is the starting point of the luminescent transition, then the temperature quenching can be caused in two ways only: first, by the temperature induced loss of excitation in the activator via the conduction band and subsequent radiationless recombination, and second: by a temperature dependent competing process, active against the end level of the luminescent transition. If this second possibility is realized, then the phosphorescence decay must be temperature dependent, for by increasing temperature the relative proportion of transitions leading to luminescence must decrease, thereby causing a faster loss of the stored excitation, which means, that the time constant of phosphorescence must increase exponentially.

This behaviour was indeed found for zinc silicates by *Kröger and Hoo-genstraaten* [19]. Their results may be thus summarized: The phosphorescence of willemite is temperature dependent above a certain temperature, irrespective of the wavelength of the excitation. This temperature, however, lies above the temperature ranges covered by the experiments referred to in the present article.

Our results which are soon to be published show that this process takes indeed place above appr. 350° centigrade, and further that to the denominator of the Mott—Gurney formula (2) another exponential must be added, with values of C about 10^9 and of E about 1,2 electron volts.

It must be emphasized, however, that below this temperature, where this quenching is not yet active, the luminescence efficiency is temperature dependent, with values of C about 10^2 — 10^3 , and of E about 0,2—0,4 electron volts.

Thus, as we have shown, that the second alternative also does not explain the situation entirely, one must look for an adequate explanation of the efficiency loss between room temperature and appr. 300°. In our model this efficiency loss can be caused only by the first mentioned mechanism: Loss of excitation from the higher activator state via the conduction band with radiationless return to the ground state. If this simplest picture cannot be maintained, one must suppose that the level reached after absorption is not the starting level of the fluorescent transition, and the efficiency loss is caused in the step: state reached in the absorption — starting point of the luminescence.

The solution of these and similar questions may be approached by studying the role and effects of killers in luminescent materials. The results, derived from appr. 25 samples of willemite, containing various amounts of manganese (activator) and iron (killer), are at present collected for publication, and it is hoped, that they may ultimately settle the question.

At present the experimental data are insufficient to enable us to decide unambiguously between mechanism of the above type and similar ones. The problem is, however, much more difficult, when one tries to identify the dielectric loss with actual conductivity. By using the reduced zone scheme we mostly arrive at a conduction caused by holes in the uppermost filled electronic band. This possibility seems to be excluded by the observations on the thermoelectric force reported by *Garlick and Gibson* [16].

This short summary contains some experimental data on willemite luminescence, mainly the newest experimental results collected from the researches conducted in our laboratory. These investigations have opened novel ways to the understating of solid state physics, and have revealed some of the shortcomings of the present theories and the inexactitude of many of the earlier results.

REFERENCES

1. G. Szigeti, *Elektrotechnika*, 1947.
2. G. Szigeti, and E. Nagy, *Műgyetemi Közlemények*, 1 (1948).
3. E. Nagy, *J. Opt. Soc. Am.*, **39**, 42 (1949).
4. K. H. Butler, *J. Electrochem. Soc.*, **93**, 143 (1948).
5. H. Brinkman, and C. C. Vlam, *Physica*, **14**, 650 (1948).
6. C. C. Vlam, *Physica*, **15**, 609 (1949).
7. F. J. Studer, and A. Rosenbaum, *J. Opt. Soc. Am.*, **39**, 685 (1949).
8. J. H. Schulman, et al., *J. Opt. Soc. Am.*, **40**, 337 (1950).
9. E. Nagy, *J. Opt. Soc. Am.*, **40**, 407 (1950).
10. G. Gergely, *J. Opt. Soc. Am.*, **40**, 357 (1950).
11. R. E. Shrader, *J. Opt. Soc. Am.*, **39**, 699 (1949).
12. K. H. Butler, *J. Electrochem. Soc.*, **95**, 267 (1949).
13. A. Radkowsky, *Phys. Rev.*, **73**, 749 (1948).
14. N. F. Mott, and R. R. Gurney, *Trans. Far. Soc.* (1938).
15. G. Szigeti, and E. Nagy, *Nature*, **160**, 641 (1947).
16. G. F. Garlick, and A. F. Gibson, *J. Opt. Soc. Am.*, **39**, 935 (1945).
17. Н. Риль, Доклады Академии Наук СССР **67**, 245 (1949).
18. Z. Bodó, *Acta Phys. Hung.*, **1**, 135 (1951).
19. F. A. Kröger, and W. Hoogenstraaten, *Physica*, **14**, 425 (1948).

ЯВЛЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И ИХ ТОЛКОВАНИЕ

Э. Надь

(Резюме)

Автор дает краткий обзор исторического развития методов исследования флюоресценции, а потом сообщает об исследованиях проведенных в научно-исследовательской лаборатории Тунгсрам с 1945 года. Разбирается полуавтоматический спектрограф для снятия спектров, как и структура полосов спектра излучения виллемитов в случае флюоресценции и фосфоресценции при различных температурах и содержаниях марганца. Исследовались также электрические свойства флюоресцентных веществ, и была установлена их тесная связь сосветовой отдачей. Полученные результаты обсуждаются с точки зрения современной теории твердых тел.

SPECTRA IN PHOSPHORESCENCE

By

E. NAGY and GY. GERGELY

RESEARCH LABORATORY FOR TELECOMMUNICATION, BUDAPEST

(Presented by Z. Gyulai. — Received 15. XII. 1950.)

Authors have investigated the emission spectrum of an artificial willemite in fluorescence and phosphorescence at various durations of excitation and at various instants after the cessation of excitation.

It was found that by ultraviolet excitation with a revolving phosphoroscope the yellow subband had disappeared in phosphorescence.

The phosphorescence decay curve after pulsed cathode-ray excitation was measured with spectrographical resolution in various parts of the spectrum with multiplier, amplifier and oscilloscope. A very rapid decay was found in the blue part of the spectrum.

In previous papers it was shown by *Szigeti, Nagy* [1], [2], [3], [4], *Butler* [5] and *Shrader* [6] that the spectrum of willemite can be separated into bands.

Phosphorescent Spectrum Measurements with the Rotating Disk Method

Recently it was found that the decay curve of phosphorescence consists of individual exponentials [7] and that these components are related to the emission bands of the phosphor [8].

In this latter investigation the luminescent material to be investigated was sprayed uniformly on a disk, which was rotated by a synchronous motor, the time of a single revolution being 160 milliseconds. The experimental arrangement is to be seen in Fig. 1.

The spectrum in phosphorescence is easily measured by projecting any part of the phosphorescent rotating disk on to the spectrograph slit. The angular displacement between the spot of excitation and that of the fixed projecting instruments measures the time which has elapsed after the cessation of the excitation. The phosphorescence spectra were measured point by point with the method of *Szigeti and Nagy* [1], [2], [3], which was used for the semi-objective determination of the fluorescent emission spectra. Comparing

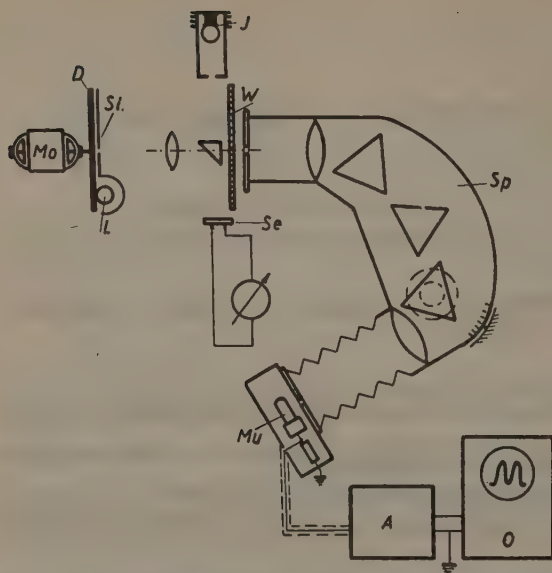


Fig. 1. Schematic layout of the arrangement for measuring the spectrum in phosphorescence. Notations: Mo. synchronous motor. L. Mercury Vapour lamp. D. Revolving disk painted with the sample. Sl. slit. J. standard incandescent lamp. W. modulator wheel. Se. Selenium photocell. Sp. Spectrograph. Mu. multiplier phototube. A. amplifier. O. C. R. oscilloscope.

the fluorescent spectra (during excitation) with the phosphorescent spectra (Fig. 2) it was found that the yellow sub-bands had completely disappeared after the phosphorescence of about 3 milliseconds. It can already be seen clearly that the decay constants of the sub-bands are greater than those of the main band.

Similar observations were made for cathode-ray excitation with the apparatus described by Gergely [7]. By interposing green and yellow filters between the spot of the cathode-ray tube and the multiplier phototube, the fastest component disappeared at the beginning of the decay.

Phosphorescence in a Single Spectral Domain

A new experimental method was developed which made possible the direct determination of the spectral location of the fastest exponential process in the decay. Fig. 3 shows the experimental arrangement.

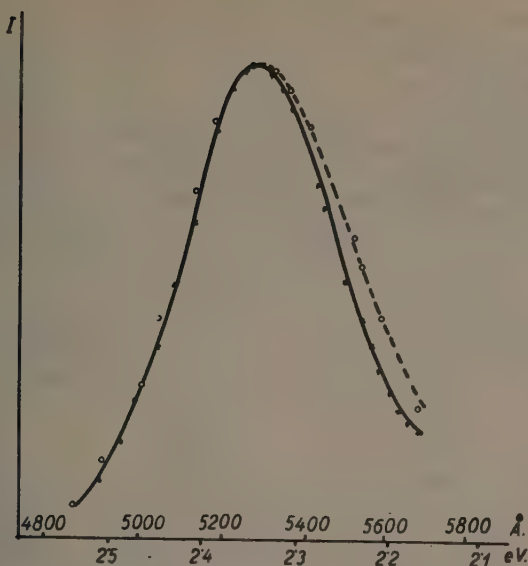


Fig. 2. Fluorescent and phosphorescent emission spectra of willemite, drawn to the same scale. Fluorescence: —o—, phosphorescence: —x—. The blue sides coincide.

The pulses of a pulse generator (Orion SP 61221) are applied to the grid of a cathode-ray tube. The luminescent spot of this tube is projected on to the slit of the spectrograph. The light, which enters the spectrograph, reaches the cathode of a multiplier phototube. This latter is mounted behind an exit slit, and can be moved to any desired spectrum locus.

The brightness of the investigated light spot on the cathode-ray tube varies according to the rise and decay of the luminescence.

The signals on the load resistance of the multiplier phototube are amplified by a three step wide band amplifier and brought to the deflecting plates of a cathode-ray oscilloscope (Orion SP 21011).

Because the multiplier current is proportional to the intensity of the incident light, the vertical deflections on the second, observing cathode-ray tube are proportional to the brightness. Applying a suitable sweeping rate to the horizontal deflecting plates, the entire rise and decay curve can be made visible.

This procedure may be repeated at any part of the spectrum and therefore the rise and decay curves can be measured separately for any desired wavelength.

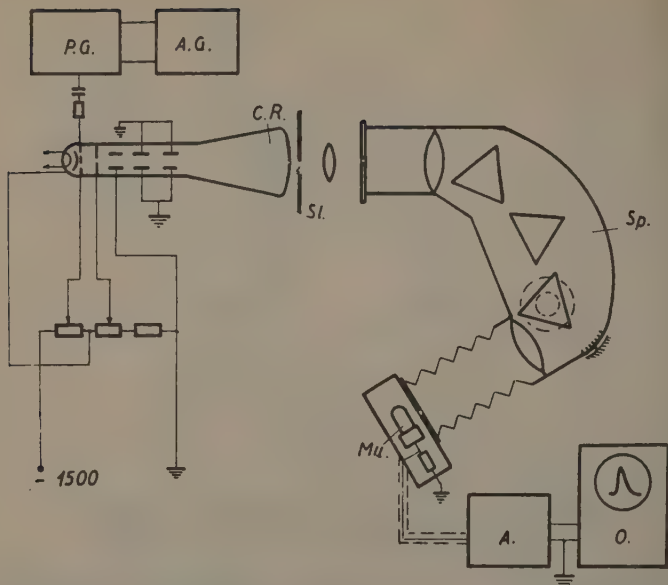


Fig. 3. Schematic layout of phosphorescence measurement after spectral resolution. Notations C. R. cathode-ray tube with the sample. Other notations as on Fig. 1.

The adoption of this new refined technique means a very significant step forward, as the same measurement was formerly possible only for the entire spectrum, unresolved by a spectrograph.

In these measurements the slit used cut out a band about 250 Angstrom wide.

Experimental Results

The experimental results at a 0,05 millisecond pulse excitation (the pulses being separated by 20 msec) are shown in Fig. 4. In Fig. 4a the rise and decay is shown in a band whose center is at about 5390 Å. This spectral domain comprises for the most part, the main band of the zinc silicate, and hardly the yellow sub-bands. The decay is predominantly slow, such as four for the slowest (last) component of the willemite phosphorescence. The results of the investigation at the blue side, at about 4600 Å, are shown in Fig. 4b. This latter decay curve is quite steep, and it is identical with that of the fastest component.

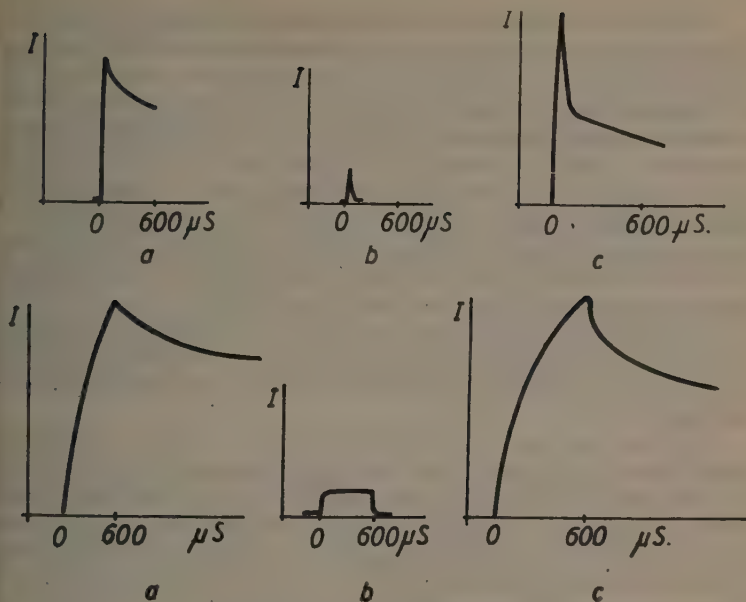


Fig. 4--5. Rise and decay in arbitrary units.

4. Excitation time 0,05 millisecc.

5. Excitation time 0.6 millisecc.

The results of the observation of the entire decay are shown in Fig. 4c. The rise and decay for the unresolved spectrum evidently contains a very fast and a slow component, the decay constants of which are identical with those observed in the spectral resolution of phosphorescence. Fig. 4c is, of course, not a simple sum of both 4a and 4b, for the fastest component has a much greater band width than the slow one, and therefore a much smaller portion of the entire band can contribute to the light in a narrow band than is the case in 4b.

Figs 5a—c show the same for 0,6 millisecond excitation. It is shown here also that the rise and decay curve in the blue part of the spectrum, 5b has the shape of the excitation pulse with a little distortion, proving again that the process in the blue is a very rapid one and has reached equilibrium much before the end of the excitation.

This result is in agreement with former observations [7], namely that the fastest component reaches equilibrium after 25—30 microseconds excitation.

In the present investigations exciting pulses shorter than 50 microseconds could not be used, because then only a very greatly diminished light intensity was available.

Before interpreting and evaluating these data one must take into account the unequal spectral response of the multipliers used. In the present investigations an RCA type 931 A multiplier (S4 spectral response) and EMI 27 (similar spectral response) were used. These multipliers have increased sensitivity towards the blue, and cut off almost completely in the red above 6200 Å. This spectral sensitivity must adequately be taken account of so as to secure the physical significance of the deductions. In all the prior publications dealing with phosphorescence this fact was entirely neglected.

Adapting these considerations to the present problem, one concludes therefore that the luminescence in the blue seems to be relatively greater than it would be with an ideal multiplier with a spectral response independent of wavelength.

The same fact makes it impossible for the present to achieve the necessary accuracy in the yellow and orange, which was possible in the blue and green.

The above measurements were carried out on an artificial willemite containing about 0,2% manganese. The fast component in the decay curve, may be well detected in samples of manganese content below about 0,3%. This blue component could not be found in samples with greater amounts of manganese, with 0,8% manganese, e. g. this component is visible only in the decay curve of the unresolved phosphorescence and there also only with a very small amplitude.

This blue emission was found to be gradually suppressed by increasing contents of manganese. One sample to which no manganese was added deliberately, thus containing only traces of it (which were fluorescent by ultraviolet excitation in a very pale green manganese emission), showed a blue fluorescence in a very wide spectral area after cathode-ray excitation.

In the measurements of the phosphorescent spectrum with the revolving disk, no unambiguous difference was found at the blue side between the fluorescent and phosphorescent emission. This discrepancy can be explained very easily, for in this case the excitation lasted 30 milliseconds, and for so long an excitation the relative contribution of the blue sub-band is practically negligible. Shorter excitations, however, could not be used because, for the point by point intercomparison measurements, much greater intensity is necessary.

Summing up the entire situation, it is very difficult to come to any conclusion about the excitation of this blue fluorescence, and the statement, that this fluorescence can be excited only by cathode-rays and not by ultraviolet radiation [9] seems to need still more confirmation.

On the yellow side of the spectrum the situation is much clearer. The yellow sub-bands were shown to have a relatively greater amplitude [3] (8—20%) and not to be seriously affected by manganese concentration.

The disappearance of the yellow sub-bands in phosphorescence was established for 6 samples, containing different amounts of manganese from 0,2 up to 6 %.

The present investigations have definitely proved the band structure of the zinc silicate emission spectrum. Apart from the theoretical aspects of the problem, a new experimental method was developed, which can furnish much more accurate results more easily.

This method besides being more direct than the photographing of the spectrum in phosphorescence, has the further advantage that the decay curves are presented at once, and there is no need for prolonged exposures.

REFERENCES

1. Gy. Szigeti, *Elektrotechnika*, **39**, 4., 5. (1947).
2. Gy. Szigeti and E. Nagy. *Műegyetemi Közlemények* (1948).
3. E. Nagy, *J. Opt. Soc. Am.*, **39**, 42 (1949).
4. E. Nagy, *Acta Phys. Hung.*, **1**, 115 (1951).
5. K. H. Butler, *J. Electrochem. Soc.*, **93**, 143 (1948).
6. R. E. Shrader, *J. Opt. Soc. Am.*, **39**, 699 (1949).
7. G. Gergely, *J. Opt. Soc. Am.*, **40**, 357 (1950).
8. F. Nagy, *J. Opt. Soc. Am.*, **40**, 407 (1950).
9. G. F. T. Garlick. *Luminescent Materials*. Oxford (1949), p. 180.

СПЕКТРЫ ПРИ ФОСФОРЕСЦЕНЦИИ

Э. Надь и Г. Гергель.

(Резюме)

Авторы исследовали спектр искусственного виллемита при флюоресценции и при фосфоресценции, с разными временами возбуждения и в различных моментах после возбуждения.

При употреблении фосфороскопа с вращающимся диском, желтые вторичные полосы фосфоресценции исчезали в случае возбуждения ультрафиолетовыми лучами.

При ударном возбуждении электронными лучами и разложении света спектро-скопом, фосфоресценция была обнаружена с помощью фотоэлектронного умножителя усилителя и осциллографа на разных местах спектра.

Была установлена присутствие в синем очень быстрого процесса.

SOME OPTICAL PROPERTIES OF LUMINESCENT POWDERS

By
ZALÁN BODÓ

RESEARCH LABORATORY FOR TELECOMMUNICATION, BUDAPEST

(Presented by Z. Gyulai. — Received 15. XII. 1950.)

The production of samples of uniform grain sizes by means of the process of repeated sedimentation, from synthetic apatite activated by manganese and antimony.

It has been determined that the brightness of this material is independent of the grain size, the reason for the decrease in light being the smaller excitation caused by the increased reflection.

The summing of the diffused reflection of the powdered material. The application of the summing to determine the coefficient of absorption.

The control of the method with material of known absorption. In the above material the coefficient of absorption is: $300 \pm 60/\text{cm}$. The control of result carried out by means of photometering under microscope.

Introduction

It is well known, and seems to be a fact long ago established, that the brightness of fluorescent powders depends on their grain size. The grinding of the powders for a prolonged period causes a considerable decrease of brightness. The amount of this efficiency loss and the dependence of brightness on the grain size were investigated in our Research Laboratory in order to find out the possible origin of this effect.

The fluorescent powder investigated was a sample of calciumchloro-fluorophosphate activated by manganese and antimony.

This powder as prepared by firing at appr. 1000°C , showed a wide grain-size distribution. Under an ordinary microscope, it was found to contain grains with sizes ranging between 1 and 100 microns. The determination of such a grain-size distribution is a tiresome project, in view of the fact, that the total volume of 3000 particles of 1μ size is only 4,7 % of the volume of a single 40μ particle. For finding the correct distribution, the dimensions of some ten thousands of grains must be known. This difficulty may be avoided by the following method.

The counting of such a great number of grains would mean enormous trouble which is not justified here. We have used therefore a simpler, and naturally less accurate method, by determining the relative numbers of grains

of various sizes. First, the grains of 1, 2, 3 and 4 microns were counted under the microscope's objective field. Altogether 300 grains of the aforesaid dimensions were counted and their relative number determined. Next we counted again 300 grains of 4, 5, 6, 7 microns dimensions, of course in a wider objective field, and determined their relative numbers. The counting of the 4 microns particles in both cases (1—4 and 4—7 micron ranges) makes possible the determination of the relative numbers of grains between 1 and 7 microns, etc. Thus we determined the entire distribution step by step. This procedure was used only to gain an approximate knowledge of the grain size distribution of the original material, the accuracy of this determination does not affect the further experiments and conclusions.

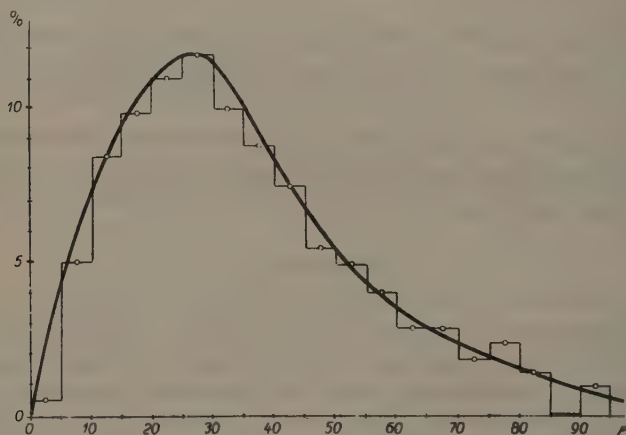


Fig. 1. Relative distribution of grain sizes in the original powder.

Fig. 1 and Table I show the distribution thus determined in intervals of 5 microns. It may be seen that the examination of 38 000 particles was replaced by the counting of 900 particles. Naturally, this method is not as correct as the original one, where 38 000 grains would have been examined but our result could be obtained with much less trouble.

Selection of samples with uniform grains size

Our first object was the selection of well defined grain sizes from this wide distribution. For this purpose the method of repeated sedimentation was used. The sedimentation was carried out in distilled water of constant

TABLE I

Grain size μ	Number of grains			Total volume 1000 μ^3	Fractional volume %
	measured		calculated		
0—5		184	22470	350	0.5
5—10		77	9390	3960	5.3
10—15		26	3172	6200	8.4
15—20	156	13	1586	7220	9.7
20—25	70		712	8120	10.9
25—30	41		417	8670	11.7
30—35	21		214	7340	9.9
35—40	122	12	122	6430	8.6
40—45	72		72	5530	7.5
45—50	38		38	4080	5.5
50—55	25		25	3620	4.9
55—60	16		16	3040	4.1
60—65	9		9	2190	3.0
65—70	7		7	2150	2.9
70—75	4		4	1570	2.1
75—80	4		4	1820	2.4
80—85	2		2	1120	1.5
85—90	0		0	0	0.0
90—95	1		1	790	1.1
Sum	300	300	38261	74200	100.0

temperature and viscosity. The grains were sedimented in a water column of predetermined height for a definite time. At the end of the sedimentation time the liquid containing the not yet sedimented particles was decanted from the sediment. Then the vessel was filled again with water to the same height, and after being shaken the mixture was sedimented again as before. Repeating this process 20 times, a clearly defined boundary was seen moving downwards during the sedimentation, and the liquid above the sediment became quite clear, showing that the liquid did not contain any more grains of sizes smaller than those desired (see Fig. 2). At this moment the sediment contained only such grains, which during all the previous sedimentations had had the opportunity of reaching the bottom of the vessel. Because of the shaking before the sedimentations, the heights of the grains at the moment of starting the sedimentation were distributed quite at random; grains of dimensions smaller

than those wanted could reach the bottom, if these grains in all the 20 sedimentations had started from the lower part of the vessel. The probability of this coincidence is of course quite negligible.

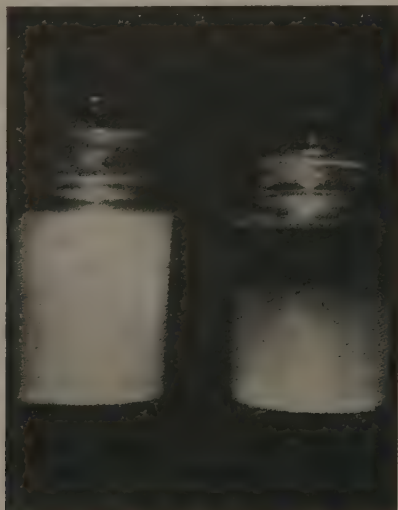


Fig. 2. First and last sedimentation. Note the clear boundary in the righthand vessel.

TABLE II

1	2		3	4	5	6	7
Specimen	Intended grain size		Actual grain size	Brightness	Reflexion in u. v.	Reflexion in visible	Brightness calculated to the same absorption
	Limits μ	average μ	n	relative	n_{uv}	n_{vis}	relative
1	30—37	33,5	40,00	99,5	10,0	88,05	90
2	9—11	10	12,25	100,0	19,0	95,0	100
3	4—5	4,5	5,20	83,5	29,0	97,0	95
4	2—2,5	2,25	2,70	65,0	13,0	95,0	93
5	1—1,25	1,13	1,35	46,0	57,0	93,0	87
Error estimated			$\pm 5\%$	$\pm 1,0$	$\pm 1,0$	$\pm 2,0$	± 6

Now, using a sedimentation time a little shorter, all the grains, which would not sediment, were decanted and collected. These grains had a very uniform size distribution determined by the difference of both sedimentation times.

5 specimens were prepared by this method. The sedimentation times to the desired grain size were chosen according to Stoke's law. The desired grain size limits are compiled in Table II column 2. The dimensions of the three coarsest fractions were ascertained by examination under the microscope. The distribution functions found are to be seen in Fig. 3. The average grain sizes found were 20 % larger than those calculated. This discrepancy was very probably caused by the assumption that Stoke's law, which is valid for spherical particles, can be used for non-spherical particles too [1]. Supposing the shape of the grains to be independent of size, the dimensions of the two finest fractions were similarly increased by 20 %. This correction was necessary, as these finest grains could not be measured under the microscope to the desired accuracy, which here was $0,1\mu$. It was established, however, that sample 4 contained grains only between 2 and 3 microns, sample 5 only between 1 and 2 microns.

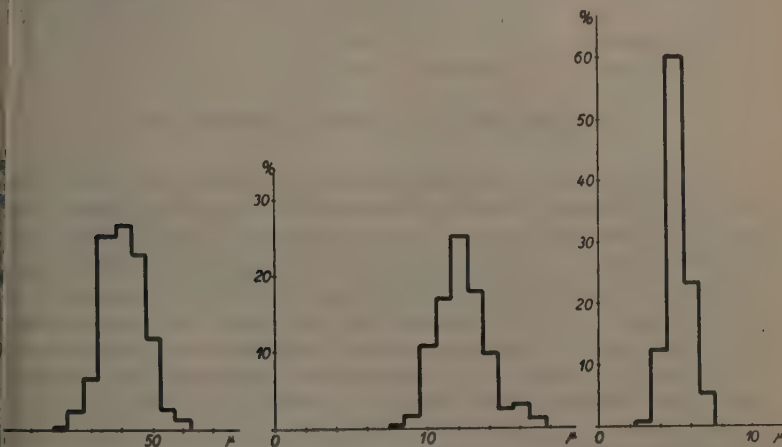


Fig 3. Relative distribution of grain sizes in the sedimented fractions.

U. V. reflection and luminescent efficiency

These five specimens were the subject of the following experiments :
 First the brightness of a practically infinite thick layer was measured by 2537 Å
 u. v. irradiation of constant light intensity. The light source used was a low

pressure mercury vapour lamp filtered for the removing of a substantial part of the visible light with Corning 9863 glass filter. The brightness of the samples was measured by a selenium barrier layer photocell, filtered with glass for the removal of the exciting ultraviolet. The experimental arrangement is to be seen in Fig. 4. The results are compiled in Table II col. 4.

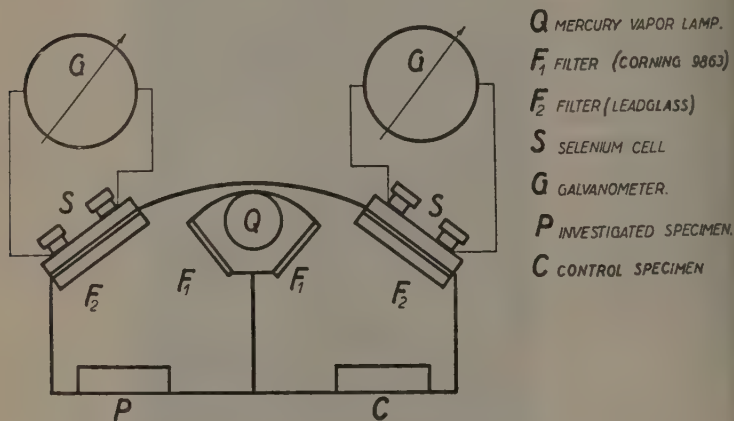


Fig. 4. Measurement for the brightness of fluorescent layers.

The data show, that a material decrease of brightness is indeed observed with this experimental set-up. In the search for the physical causes of the efficiency loss, it must first be ascertained whether each sample had indeed received the same amount of excitation. Although the excitation intensity was in fact constant (more properly, the results were always calculated to the same excitation, so as to compensate for the eventual fluctuations of lamp output), the amount of ultraviolet absorbed in the layer, which is the measure of the effective excitation, ought not to have been the same, because of the greater diffuse reflexion of particles of smaller dimensions. This consideration has led to the measurement of the reflected u. v., which was accomplished as shown in Fig. 5. The powder was mounted within an integrating sphere, whose walls were covered by smoked MgO , and illuminated by a pencil of u. v. rays, and the brightness of a spot on the wall of the sphere was measured by a multiplier phototube, sensitive only to u. v. The same experiment was repeated with a sample of pure MgO , which has a reflexion coefficient of 95% at 2537 Å [2]. The reflexion coefficient of the phosphor sample was calculated in absolute units by using this value for MgO . The results compiled in Table

col. 5 show that the quantity of the reflected light strongly increases as the grain dimensions are diminished.

It is therefore evident that the brightness is to be investigated in its dependence on that excitation, which is in fact absorbed by the phosphor

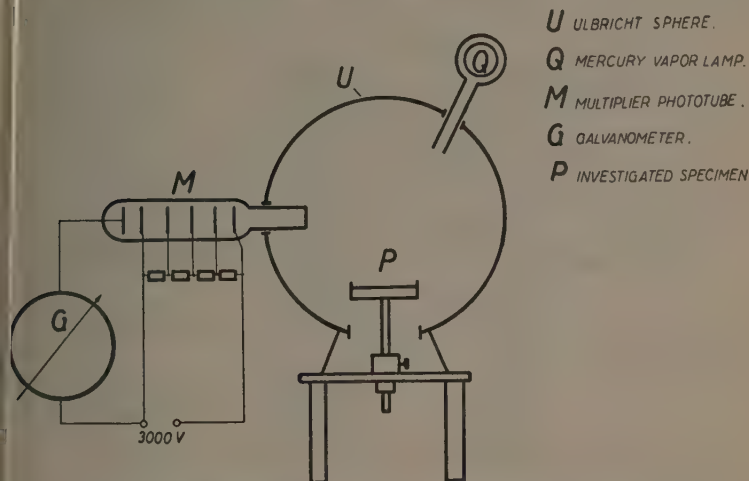


Fig. 5. Measurement of the diffuse reflectivity.

layer, thus the amount of the u. v. reflected must be subtracted from the constant lamp output. The brightness of the samples calculated to the same quantity of absorbed light is shown in Table II col. 7. It can be seen, that the brightness slowly decreases towards the larger grains. The efficiency decrease towards the finest grains is also slight and may be even non-existent. The reason for this assumption is the relatively small quantity of finest grains separated, and the gradual contamination of this fraction in the course of separation. These contaminations were either due to the original material or to the numerous washings with distilled water.

This hypothesis of the gradual concentration of contaminations in the finest sample finds an experimental support in the results of the measurements of the visible reflexion (Table II col. 5), which again shows a decrease in the finest grains instead of the increase expected.

The above investigations and considerations clearly show, that for this material and in the area investigated ($1-40\ \mu$) the effective light efficiency is almost independent of the grain size.

Calculation of the reflection and absorption coefficients

Assuming the powder to be built up by several parallel layers, and denoting the reflected light on the i -th layer by γ_i , that transmitted through the i -th layer by β_i , the following recursion holds between γ_{n-1} , β_{n-1} , and γ_n , β_n , (see Fig. 6)

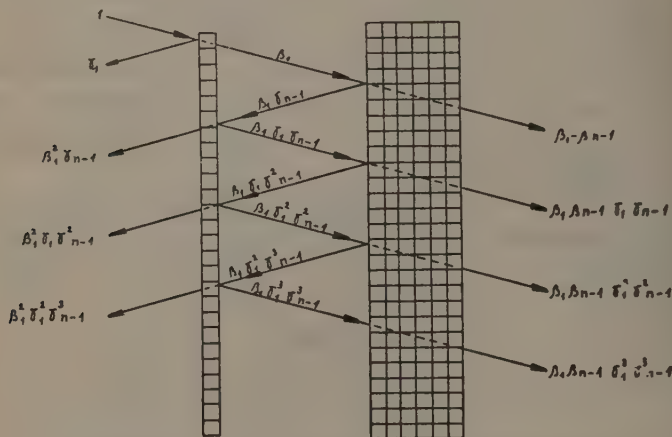


Fig. 6. Calculation of the transmission and reflexion for successive layers.

$$\gamma_n = \gamma_1 + \beta_1^2 \gamma_{n-1} + \beta_1^2 \gamma_1 \gamma_{n-1}^2 + \beta_1^2 \gamma_1^2 \gamma_{n-1}^3 + \dots \quad (1)$$

$$\beta_n = \beta_1 \beta_{n-1} + \beta_1 \beta_{n-1} \gamma_1 \gamma_{n-1} + \beta_1 \beta_{n-1} \gamma_1^2 \gamma_{n-1}^2 + \beta_1 \beta_{n-1} \gamma_1^3 \gamma_{n-1}^3 + \dots \quad (2)$$

The summation of both series gives :

$$\gamma_n = \gamma_1 + \frac{\beta_1^2 \gamma_{n-1}}{1 - \gamma_1 \gamma_{n-1}} \quad (3)$$

$$\beta_n = \frac{\beta_1 \beta_{n-1}}{1 - \gamma_1 \gamma_{n-1}}. \quad (4)$$

For $n \rightarrow \infty$ these equations can be solved by putting γ_{n-1} , $\gamma_n \rightarrow \gamma$ and $\beta_n \rightarrow \beta$ thus from equation (3) :

$$\gamma_\infty = \gamma_1 + \frac{\beta_1^2 \gamma_\infty}{1 - \gamma_1 \gamma_\infty} \quad (5)$$

and solved for γ_∞

$$\gamma_{\infty} = \frac{1 + \gamma_1^2 - \beta_1^2}{2\gamma_1} - \sqrt{\left(\frac{1 + \gamma_1^2 - \beta_1^2}{2\gamma_1}\right)^2 - 1} \quad (6)$$

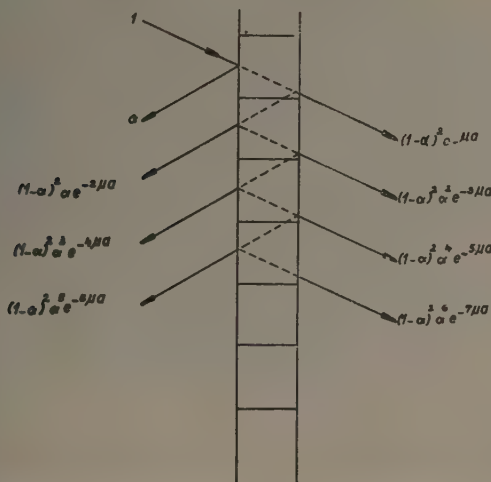


Fig. 7. Transmission and reflexion of a single absorbing layer.

The light reflected and transmitted through the first layer is calculated similarly. Denoting the coefficient of the reflexion on the surface by α , the layer thickness, i. e. the grain size by a , the absorption coefficient of the u. v. radiation by μ (see Fig. 7) we have

$$\gamma_1 = \alpha + (1-\alpha)^2 \alpha e^{-2\mu a} + (1-\alpha)^2 \alpha^3 e^{-4\mu a} + (1-\alpha)^2 \alpha^5 e^{-6\mu a} + \dots$$

$$\beta_1 = (1-\alpha)^2 e^{-\mu a} + (1-\alpha)^2 \alpha^2 e^{-3\mu a} + (1-\alpha)^2 \alpha^4 e^{-5\mu a} + (1-\alpha)^2 \alpha^6 e^{-7\mu a} + \dots$$

Summing these series again we get

(8)

$$\gamma_1 = \frac{\alpha(1 + e^{-2\mu a} - 2\alpha e^{-2\mu a})}{1 - \alpha^2 e^{-2\mu a}} \quad (9)$$

$$\beta_1 = \frac{(1-\alpha)^2 e^{-\mu a}}{1 - \alpha^2 e^{-2\mu a}} \quad (10)$$

These calculations show that γ_{∞} , the amount of light reflected by an infinite thick layer, is a function of α and μa alone, and with $\mu a \rightarrow \infty$, tending

to a limiting value of $\gamma_{\infty} \rightarrow a$. Our measurements have given $a = 0,10$ and γ_{∞} was calculated from equations (6), (9) and (10) for several values of μa . The values so calculated are plotted in Fig. 8 as $f(\log \mu a)$ with a full line.

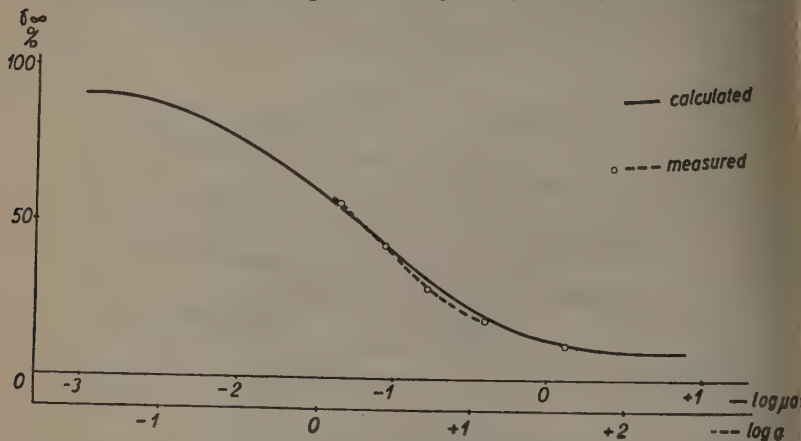


Fig. 8. Calculated and measured diffuse reflexion as a function of absorption coefficient and grain size.

In the same figure were plotted the measured values of γ_{∞} as function of $\log a$. Because of the relation $\log \mu a = \log a + \log \mu$ both curves can be brought to coincidence by a horizontal parallel displacement. This displacement is already performed in Fig. 8 and both curves could be brought to complete overlapping by a horizontal parallel displacement corresponding to $\mu = 300 \text{ cm}^{-1}$.

Checking of the formulae

So as to check the accuracy of the absorption coefficient thus determined, the same method was applied to a coloured (violet) glass. The coloured glass was ground in a steel mortar. The eventual ferrous contaminations caused thereby were removed by washing with hydrochloric acid. This ground glass was separated into 8 specimens, 4 of them by sieving (greater grain sizes) and the other 4 by sedimentation (minute grains).

Fig. 9 shows the photograph of the specimens. The first phial contains large fragments of the original glass, phials 2—9 the eight specimens. The colour of the specimens becomes steadily whiter, the last specimen already seems to be quite white. The tenth phial contains the same material as the

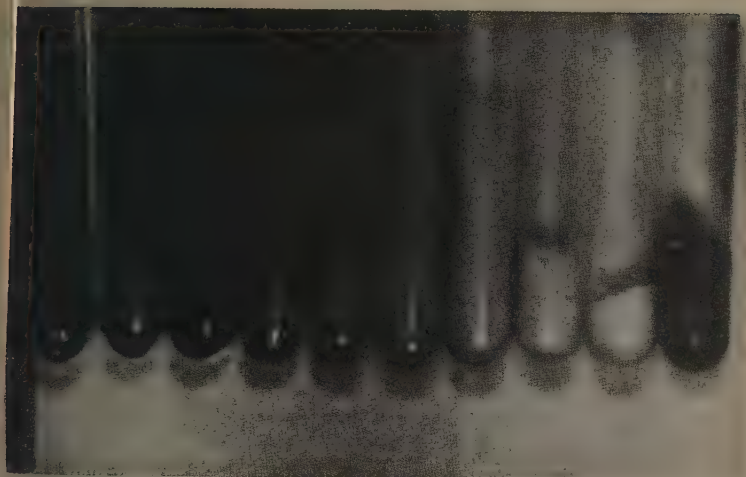


Fig. 9. Powdered violet coloured glass of grain sizes decreasing to the right. At the extreme right glass of the minutest grain size in a liquid of approximately the same refraction index.

in a phial (minutest grains), whetted by a benzene-carbon disulphide mixture, the refractive index of which is very close to that of the glass investigated. The contents of this phial are again quite dark, because of the very substantially reduced reflexions.

TABLE III

Specimen	Grain size average μ	Reflexion in %		
		violet	green	2537 Å
1	648	12,5	6,0	5,5
2	463	16,8	9,4	5,5
3	194	31,7	23,4	5,1
4	92,9	40,8	31,3	5,1
5	35,5	54,0	45,7	4,4
6	21,8	61,5	54,8	5,5
7	12,37	72,2	65,3	8,0
8	5,48	77,2	71,6	16,3

The average grain sizes, measured under the microscope are shown in Table III col. 2. The following columns show the reflections in filtered violet, green, and 2537 Å ultra-violet. The first two measurements were made with a selenium photocell, the last one with the same arrangement as for the apatite.

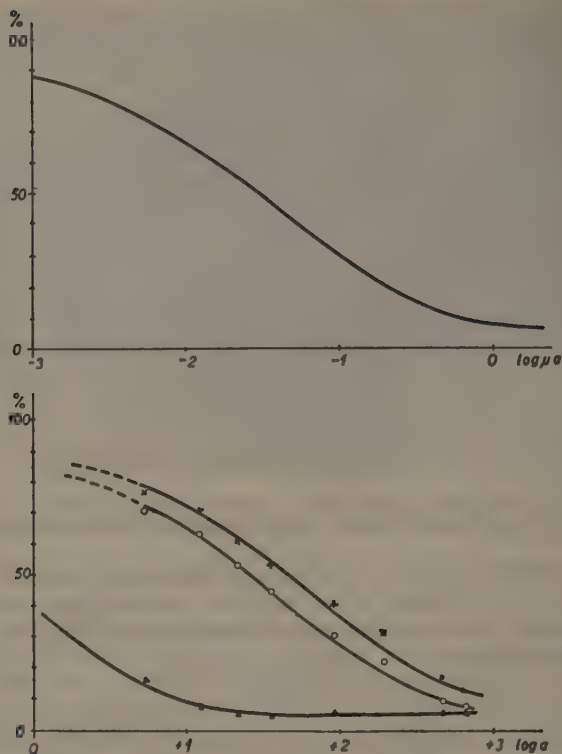


Fig. 10. a) Calculated diffuse reflexion of glass as a function of grain size and absorptivity coefficient.

b) Measured diffuse reflexion of glass for three colours. x: in the violet, o: in the green, Δ: for 2537 Å.

Fig. 10 shows γ_{∞} as function of the grain size with $a = 0,055$. The measured points are brought to coincidence with the calculated curve. The absorptivity coefficients so determined are $6,3 \text{ cm}^{-1}$ in the violet, $11,5 \text{ cm}^{-1}$ in the green, and 550 cm^{-1} for 2537 Å.

These absorption coefficients were also determined directly for the glass. The measurements were performed in the visible on a plane parallel plate 2,95 mm thick, in the ultraviolet on a foil 30 microns thick. The results were $6,41 \text{ cm}^{-1}$ in the violet, $12,26 \text{ cm}^{-1}$ in the green, 491 cm^{-1} in the ultraviolet.

The accuracy of the results is quite satisfactory and perhaps better than could be expected. The good agreement may have been caused by chance compensation of errors arising from approximations. One of these approximations was to assume parallel light, neglecting that the effective path of light through grains of varying shape is shorter than in parallel layers. This error is counteracted by neglecting total reflection inside the grains.

In conclusion it can be said with fair certainty that the measurements and calculations give results, which do not differ from the actual value by more than $\pm 20\%$.

In the case of apatite too, the absorption coefficient thus calculated (330 cm^{-1}) is certainly accurate to within $\pm 20\%$.

Photometering under microscope

The value for the overall absorption coefficient could be checked by yet another experiment. The previous calculation shows that the light absorbed by a single grain (the first grain of a layer) is represented by $1 - \beta_1 - \gamma_1$.

Assuming the absorption coefficient $\mu = 300 \text{ cm}^{-1}$ and plotting this quantity versus grain size, the curve of Fig. 11 results.

The brightness of the individual grains of the fluorescent powder could be measured for three grain sizes by photometering them under a microscope. The experimental arrangement is to be seen in Fig. 12. The grains, illumi-

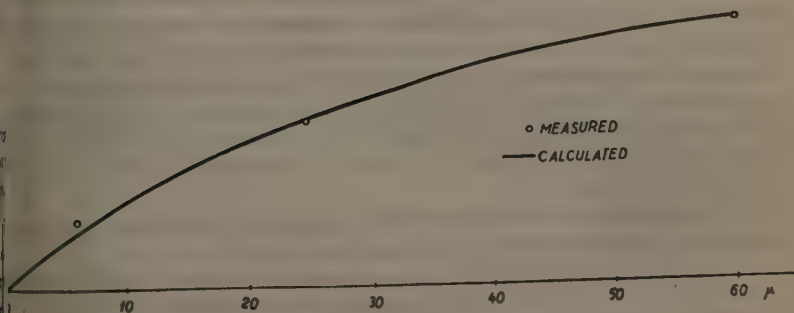


Fig. 11. Averaged brightness of single luminescent grains, as measured under the microscope.

nated from behind, seem quite opaque, for they strongly scatter the light rays coming from behind because of their irregular shapes. The grains were dispersed on a glass slide, illuminated in front by a monochromatic ultraviolet and illuminated from behind by the same colour as the emission of the powder. This background illumination was achieved with the same light source, but the fluorescence of a standard sample of the same luminescent material, reflected by a suitable mirror and a lens. This background illumination was intercepted by a neutral wedge which could vary the background illumination from 1 to 200. In the case of the measurement the wedge was brought to the position where the contours disappeared, showing equal brightness of the

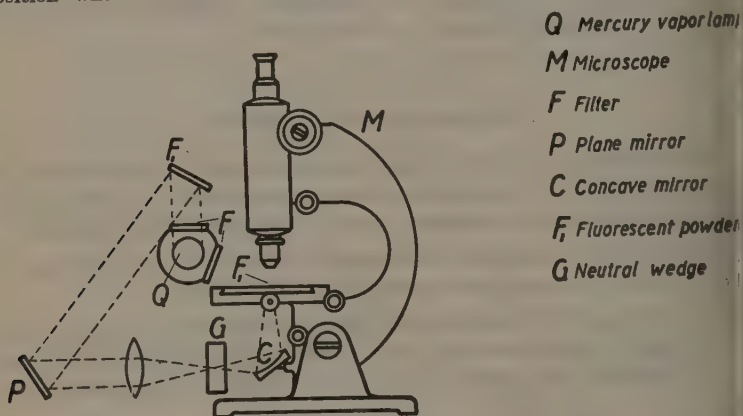


Fig. 12. Schematic layout of the apparatus for the measurement of brightness of single grains.

fluorescent particle with that of the background. The wedge was adjusted by means of a clogged rod and wheel, the readings were taken on a revolution indicator, which was found to be very convenient. The position of this wedge indicated the brightness of the individual grains in units, determined by the optics and the geometrical arrangement of the apparatus. The fluctuations of the exciting ultraviolet radiation are here not disturbing, because the excitation and background illumination are both proportional to the ultraviolet output of the lamp.

The results, each the average of the brightness of 200 grains, are plotted in Fig. 11. The agreement is satisfactory.

The measured value of the ultraviolet reflection gives an estimate for the refractive index of the material. According to the measurements it was 0.10. Applying the formula

$$\alpha = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 \quad (11)$$

and for normal incidence we get $n = 1.93$. The reflected light is greater for larger angles of incidence, and because the light is reflected on planes inclined

TABLE IV

	Calculated $\mu \text{ cm}^{-1}$	
	from the parallel plate	from the diffuse reflexion
ultraviolet	6,41	6,3
green	12,26	11,5
537 Å	491,0	550

apatite at random, the refractive index is certainly less, than the value so determined. We could not find data in the literature for the refractive index of apatite for this wavelength. In the visible light the refractive index is approx. 1,64. Because of a strong absorption in the ultraviolet, the calculated value of the refractive index seems very plausible.

Conclusions

It was shown that the brightness of the synthetic apatite activated by manganese and antimony is independent of the grain size, the reduced brightness of the smaller grains is caused merely by geometric optical properties of the powder, and has nothing to do with the process of luminescence.

The absorption coefficient of a powdered material was measured and found to be $\mu = 300 \pm 60 \text{ cm}^{-1}$.

Here must be mentioned the investigations of *Brumberg* and *Pekerman* [3] who found for $\text{ZnS} \cdot \text{Cu}$, excited by 3650 Å $\mu = 200 \text{ cm}^{-1}$ and the similar calculations of *Benford* [4] for the optics of a diffusing medium.

REFERENCES

1. I. M. Dalla-Valle, *Micromeritics*, Pitman, New-York, London, 1948, p. 20, Table 2.
2. Benford, Schwarz, Lloyd, *J. Opt. Soc. Am.*, **38**, 964 (1948).
3. Brumberg—Pekermann, *Dokladi Akademii Nauk SSSR*, **61**, 43., 6 (1948).
4. Benford, *J. Opt. Soc. Am.*, **36**, 524 (1946).

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ПОРОШКОВ.

З. Бодо

(Резюме)

Изготовление образцов однородной зернистости посредством повторенного осаждения из искусственного апатита активированного марганцем и сурьмой. Была установлена независимость световой отдачи этого вещества от зернистости. Причиной уменьшения излучения света является уменьшающееся вследствие большей рефлексии возбуждение. Вычисление рассеянного отражения* у порошкообразных веществ. Применение вычисления к определению коэффициента поглощения. Проверка метода с помощью вещества с известным поглощением. Коэффициент поглощения у вышеупомянутого вещества : 300 ± 60 см. Проверка результата фотометрированием под микроскопом.

ÜBER EINEN ZUSAMMENHANG ZWISCHEN GRAVITATION UND MAGNETISMUS

Von

TH. NEUGEBAUER

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Vorgelegt von L. Jánossy. — Eingegangen 5. IX. 1950.)

Es wird gezeigt, dass bei kondensierter Materie die Gravitationskraft bei jedem Atom in elektrischen Schwerpunkt der äusseren Elektronenhülle und das übriggebliebene positive Atomzentrum zueinander ein wenig verschiebt, infolge der Drehbewegung eines Himmelskörpers tritt infolgedessen zwangsläufig ein magnetisches Feld auf. Bei kleineren sich drehenden Körpern verursacht die Zentrifugalkraft auf analoge Weise ein magnetisches Moment. Gegenüber dem Barnett-Effekt, bei dem im Falle einer rotierenden Kugel das magnetische Moment zum Volumen und zur Winkelgeschwindigkeit proportional ist, ist im Falle der neuen Art von Rotationsmagnetismus bei kleinen Körpern der Effekt zur dritten Potenz der Winkelgeschwindigkeit und zur fünften Potenz des Halbmessers proportional. Bei Himmelskörpern, bei denen die Gravitationskraft den neuen Effekt verursacht, ist er zur Winkelgeschwindigkeit, zur Masse des Himmelskörpers, zur Schwerebeschleunigung und ausserdem noch zum Halbmesser proportional. Zur Erklärung des magnetischen Momentes der Erde ist der neue Effekt nicht genügend gross, es liegt jedoch die Möglichkeit eines Verstärkermagnetismus vor, der einen Effekt von der gewünschten Grössenordnung verursachen kann.

Im letzten Paragraphen wird eine sehr merkwürdige numerische Übereinstimmung ausgesprochen, nach der man nicht nur grössenordnungsmässig sondern fast genau die Grösse des Erdmagnetischen Momentes erhält, wenn man als Gedankenexperiment die Spinnmomente aller die Erde aufbauenden Atomkerne zueinander parallel einstellt. Es liegt jedoch keine bis jetzt bekannte theoretische Möglichkeit vor, welche solch eine Parallelstellung erklären könnte.

Einleitung. Die im Zusammenhang mit dem noch ungelösten Problem des Erd- und Stellarmagnetismus in den vergangenen Jahren besonders von Blackett [1] geäusserten Vermutungen, nach denen ein fundamentaler Zusammenhang zwischen Gravitation und Magnetismus bestehen soll, machen es notwendig, alle theoretischen Möglichkeiten eines solchen Zusammenhanges zu untersuchen. Unter Erweiterung der allgemeinen Relativitätstheorie mit neuen Hypothesen wurde von Clark [2] eine Theorie ausgearbeitet, aus der tatsächlich der von Blackett vermutete bzw. schon von Wilson [3] angegebene theoretische Zusammenhang zwischen dem mechanischen und magnetischen Moment eines sich drehenden Körpers folgt. Analoge, sich auf eine fünfdimensionale Welt beziehende Gedanken rühren von Gião [4] her. Weiter haben sich Batchelor und Towsend [5]¹ im Zusammenhang mit dem Problem des

¹ Die ersten diesbezüglichen Gedanken rühren von H. Alfvén her [6].

magnetischen Momentes der Himmelskörper mit dem bei einer turbulenten Bewegung einer leitenden Flüssigkeit spontan auftretenden Magnetfeld beschäftigt. *Walen* [7] versuchte auf diesem Wege das magnetische Moment der Sonne und *Bullard* [8] das der Erde zu erklären. Ein anderer Gedanke stammt von *Benfield* [9], der darauf aufmerksam gemacht hat, dass, wenn ein Teil eines Stück Metalles unter sehr hohem Druck steht, ein kleiner Bruchteil des Elektronengases notwendigerweise von diesem Teil in den anderen unter kleinerem Druck stehenden übergehen muss, also teilweise eine Ladungstrennung auftritt. Da weiter nach der alten Auffassung der Erdkern aus geschmolzenen Metallen besteht, so muss das Innere des Erdkernes eine positive, der äussere Teil dagegen eine negative Ladung besitzen. Diese Auffassung liefert das richtige Vorzeichen des Erdmagnetismus, die Grössenordnung ist jedoch wie das schon *Benfield* vermutet hat, und wir es hier im folgenden berechnen werden, viel zu klein.

Nach der schon erwähnten Hypothese von *Wilson* [3] sollte nach Analogie des Biot—Savartschen Gesetzes

$$H = \frac{e}{c r^3} [\mathbf{v}, \mathbf{r}] \quad (1)$$

ein analoges Gesetz für das magnetische Feld der sich bewegenden (ungeladenen) Materie bestehen, also

$$H = - \frac{M}{c r^3} [\mathbf{v}, \mathbf{r}], \quad (2)$$

wo man, damit die Gleichung auch dimensionell richtig ist, M in Gravitations-einheiten ausdrücken muss, also muss man

$$M = g^{1/2} m \quad (3)$$

setzen, wo g die Gravitationskonstante ist, und m die Masse in der gewöhnlichen Einheit bedeutet. (2) würde tatsächlich die Grössenordnung des gemessenen Verhältnisses von mechanischem und magnetischem Moment der Erde der Sonne und das Verhältnis dieser zwei bei dem Stern 78 Virginis von *Babcock* [10] gemessenen Grössen einwandfrei erklären. Doch kann, wie das Messungsergebnisse zeigen, bei Translationsbewegungen (2) unmöglich bestehen, es wäre also nur noch übrig anzunehmen, dass ein solcher Zusammenhang bloss bei Rotationsbewegungen auftritt. Diese Auffassung führt jedoch zu Widersprüchen mit der Relativitätstheorie. Analoge Verhältnisse liegen beim Neutron jedoch tatsächlich vor, das ein magnetisches Moment hat, ohne eine Ladung

zu besitzen. Bei einem Elementarteilchen fallen jedoch die erwähnten theoretischen Schwierigkeiten grösstenteils weg, ausserdem entsteht nach der *Wick'schen* Hypothese das magnetische Moment des Neutrons auf die Weise, dass das Neutron virtuell in ein Proton und ein Meson oder analog in andere Elementarteilchen zerlegt ist.

Nach *Sutherland* [11] könnte man das magnetische Moment der Erde unter Annahme einer positiven Ladung des Erdinneren umgeben von einer negativen Hülle erklären. Diese Auffassung hätte den grossen Vorteil, dass die Erde danach im ganzen elektrisch neutral sein könnte, wie das ja auch tatsächlich der Fall ist; zur Erklärung des Erdfeldes müsste man jedoch so grosse Ladungen annehmen, dass daraus ein Gradient von der Grösse $10^8 \frac{\text{Volt}}{\text{cm}}$ folgen würde, und kein bekannter Isolator besitzt eine so grosse elektrische Festigkeit.

Als einzige bekannte Ursache derzufolge ein sich drehender Körper ein magnetisches Moment besitzt, wäre der Barnett-Effekt zu betrachten. Wie jedoch *Chapman* und *Bartels* [12] gezeigt haben, liefert dieser Effekt zwar das richtige Vorzeichen ist jedoch um 10 Grössenordnungen zu klein.

Im folgenden soll ein bis jetzt nicht beachteter Effekt besprochen werden, der ohne Einführung von willkürlichen Hypothesen zwangsläufig zu einem Zusammenhang zwischen Gravitation und magnetischem Moment führt.

§ 1. Nehmen wir an, dass es sich um so dicht gepackte Materie (feste Körper, Flüssigkeiten, sehr stark verdichtete Gase) handelt, dass infolge des Pauliprinzips die Abstossung der Ladungswolken die Entfernungen der Atome oder Ionen bestimmt. Unter der Wirkung der Gravitation wird erstens eine solche Materie selbstverständlich etwas zusammengepresst, andererseits werden jedoch die Atomkerne (samt der inneren Elektronen) in der Richtung des Gradienten des Gravitationspotentials im Verhältnis zu ihrer Elektronenhülle, die wegen der Abstossung der Nachbarn infolge des Pauliprinzips (Fermi-abstossung) ihnen nicht folgen kann, etwas verschoben, und' daraus folgt eine Art Polarisierung infolge des Gravitationsfeldes einfach aus dem Umstande, dass die vorhandene Masse grösstenteils an positive Ladungen gebunden ist. In einem normalen Gase entsteht diese Erscheinung jedoch nicht, weil in ihm die ungestörte Elektronenhülle der Bewegung der Atomkerne augenblicklich folgt. Anders ausgedrückt entsteht dort nun eine Massenverteilung entsprechend der barometrischen Höhenformel ohne Polarisationserscheinungen. Die Verhältnisse werden jedoch wieder anders, wenn Gasatome auf eine starre wagrechte Oberfläche aufprallen.

Nehmen wir also an, dass das fragliche Atom oder Ion acht äussere Elektronen besitzt, und bezeichnen wir die Masse des Atomkernes mit M und das

innere elektrische Feld, das infolge der Polarisation von diesem Atom auftritt, mit E . Die Polarisation wollen wir jetzt vereinfacht unter der Annahme betrachten, dass die äussere Elektronenachterschale und der Kern samt der inneren Elektronen im Verhältnis zueinander verschoben werden. Aus der Gleichheit der Kräfte folgt

$$Mg = 8eE, \quad (4)$$

wo g die Gravitationskonstante und e die Elektronenladung bedeutet. Aus (4) erhalten wir

$$E = \frac{Mg}{8e}. \quad (5)$$

Weiter muss die Energiegleichung bestehen

$$\frac{1}{2}\alpha E^2 = \frac{1}{2}Mgl, \quad (6)$$

wo l die Verschiebung des Kernes infolge der Gravitation und α die Polarisierbarkeit des Atoms, bei dem wir nur die äussere Achterschale als deformabel angenommen haben, was in sehr guter Näherung den wirklichen Verhältnissen entspricht, bedeutet. Aus (6) folgt für l

$$l = \frac{\alpha E^2}{Mg} \quad (7)$$

und mit Hilfe von (5)

$$l = \frac{Mg\alpha}{64e^2}. \quad (8)$$

Alle Ladungen beschreiben einen Kreis infolge der Umdrehung der Erde. Bezeichnen wir mit N die Zahl der Atome in der Volumeneinheit, so haben wir $8Ne$ negative und um die Strecke l verschobene ebensoviele positive Ladungen also die Stromdichte

$$\pm \frac{8Ne}{T}, \quad (9)$$

wo $T = 86\,164,1$ sec die Länge des siderischen Tages bedeutet. Für das von den Elektronen erzeugte magnetische Moment folgt

$$\mu_1 = \frac{if}{c} = \frac{\pi r^2}{c} \frac{8Ne}{T} \quad (10)$$

und für das von den positiven Ladungen erzeugte

$$\mu_2 = \frac{if'}{c} = \frac{\pi (r-l')^2}{c} \frac{8Ne}{T}, \quad (11)$$

o r die Entfernung von der Erdachse bedeutet. Aus (10) und (11) folgt endlich

$$\mu = \mu_1 - \mu_2 = \frac{2\pi r l'}{c} \frac{8Ne}{T}. \quad (12)$$

2) muss jetzt über das Volumen einer Kugelschale integriert werden. Zu dem Zwecke führen wir ein räumliches Polarkoordinatensystem ein, dann folgt

$$\left. \begin{aligned} r &= R \sin \Theta \\ l' &= l \sin \Theta \end{aligned} \right\}. \quad (13)$$

Also erhalten wir das Integral

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \frac{2\pi}{c} \frac{8Ne l}{T} \left[\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} R^3 \sin^3 \Theta d\Theta d\varphi \right] \Delta R \\ &= \frac{128\pi^2 Ne l R^3}{3cT} \Delta R. \end{aligned} \quad (14)$$

Das ist das magnetische Moment einer Kugelschale. Um die ganze Erde aus solchen Kugelschalen zusammensetzen zu können, müssen wir noch vor der Integration l als Funktion von R ausdrücken. Zu diesem Zwecke wollen wir zuerst annehmen, dass die Erde eine Kugel von homogener Dichte ist. Für das Gravitationspotential folgt dann

$$V = 2\pi f \kappa (R_0^2 - \frac{1}{3} R^2), \quad (15)$$

wo R_0 den Halbmesser der Erde und κ die homogene Dichte bedeuten. Aus (15) folgt für die Kraft

$$k = - \frac{dV}{dR} = \frac{4\pi}{3} f \kappa R, \quad (16)$$

also haben wir auf der Oberfläche der Erde

$$g_0 = \frac{4\pi}{3} f \kappa R_0. \quad (17)$$

Aus (16) und (17) erhalten wir

$$g = \frac{g_0}{R_0} R, \quad (18)$$

und wenn wir dieses Resultat in (8) einsetzen

$$l = \frac{2M\alpha g_0}{128e^2 R_0} R. \quad (19)$$

Endlich können wir mit Hilfe von (19) in (14) die Integration nach R ausführen

$$m = \int_0^{R_0} \mu_0(R) dR = \frac{2\pi^2 NM \alpha g_0}{3cTeR_0} \int_0^{R_0} R^4 dR = \frac{2\pi^2 NM \alpha g_0}{15cTe} R_0^4. \quad (20)$$

Wir sehen also, dass ein sich drehender Körper infolge seines eigenen Gravitationsfeldes und der immer vorhandenen Polarisierbarkeit seiner Atome zwangsläufig ein magnetisches Feld erzeugt.

§ 2. Eine weitere Frage ist, wie die Verhältnisse bei relativ kleinen sich drehenden Körpern sein werden, wo also nicht die Gravitation, sondern die Zentrifugalkraft die Hauptrolle spielt. Selbstverständlich kann man relativistisch das Zentrifugalfeld ebenfalls als ein Gravitationsfeld auffassen, doch besteht der Unterschied, dass das Gravitationsfeld eine Kugel zusammenzuziehen bestrebt ist, wozu jedoch die Möglichkeiten beschränkt sind, die Zentrifugalkraft will sie jedoch ausdehnen. Die Atomkerne können also bis zu einem gewissen Masse die Elektronenwolken mitnehmen, da jedoch nach der quantenmechanischen Theorie der chemischen Bindung die Elektronenwolken gebundener Atome sich überlappen müssen, so ist doch auch hier die Möglichkeit gegeben, dass die Atomkerne relativ zu ihren Elektronenwolken infolge der Zentrifugalkraft verrückt werden.

Bezeichnen wir mit ω die Winkelgeschwindigkeit des sich drehenden Körpers, dann erhalten wir unter alleiniger Berücksichtigung der Zentrifugalkraft statt (4) und (6) die Gleichungen

$$M\omega^2 r = 8eE \quad (21)$$

und

$$\frac{1}{2} \alpha E^2 = \frac{1}{2} M\omega^2 r l \quad (22)$$

und mit Hilfe von ganz analogen Rechnungen, welche zu dem Resultat (20) führten, erhalten wir jetzt

$$m_s = - \frac{N\omega^3 M \alpha \pi}{15ec} R_0^5. \quad (23)$$

Es ist interessant, (23) mit dem infolge des Barnett-Effektes auftretenden magnetischen Momente zu vergleichen. Bekannterweise ist dies letztere Moment zu dem Volumen der Kugel und zur Winkelgeschwindigkeit proportional. Nach (23) ist dagegen das aus dem neuen Effekt folgende magnetische Moment ausser zu dem Volumen der Kugel und der dritten Potenz der Winkelgeschwindigkeit noch zu dem Quadrat des Halbmessers proportional. Das jetztere Moment wird zwar in den meisten Fällen grössenordnungsmässig

kleiner als das vom Barnett-Effekt verursachte sein, da man jedoch in neuerer Zeit schon enorm hohe Drehgeschwindigkeiten herstellen konnte, so ist eben wegen der Abhängigkeit von der Winkelgeschwindigkeit die Möglichkeit vorhanden, (23) auf experimentellem Wege zu verifizieren.

§ 3. Jetzt wollen wir noch das aus (20) folgende magnetische Moment der Erde berechnen. Da die näher zur Oberfläche liegenden Schichten die Hauptrolle spielen werden, so wollen wir hauptsächlich deren numerische Daten benützen. Als mittleres Atomgewicht der SiAl und SiMa Schichten führen wir 27 ein, daraus folgt für die mittlere Kernmasse $M = 36,3 \cdot 10^{24} \text{g}$. Für N folgt unter Annahme einer mittleren Dichte 5,5 der Wert $1,5 \cdot 10^{23}$. Wenn wir diese Zahlenangaben für N und M und für die übrigen in (20) stehenden Grössen die bekannten Werte einsetzen, so folgt

$$m \sim 10^9, \quad (24)$$

also ebenso wie bei Berücksichtigung des Barnett-Effektes ein grössenordnungsmässig zu kleiner Wert, weil das gemessene Moment der Erde $7,9 \cdot 10^{25}$ elst. Einh. beträgt. Es ist aber zu bemerken, dass der hier besprochene Effekt das richtige Vorzeichen liefert ebenso wie der Barnett-Effekt, was man gleich einsieht, wenn man bedenkt, dass das Erdfeld dasselbe Vorzeichen besitzt, wie wenn es von von Westen nach Osten sich bewegenden negativen Ladungen verursacht wäre; und das ist hier tatsächlich der Fall, weil ja die Schwerpunkte der Elektronenwolken den grösseren Kreis beschreiben.

Ausserdem besteht bei dem neuen Effekt der grosse Unterschied gegenüber dem Barnett-Effekt, dass, wie wir das in § 5 sehen werden, ein Verstärkermechanismus denkbar ist, mit dessen Hilfe das tatsächlich gemessene Moment auftreten kann.

§ 4. Jetzt wollen wir noch das magnetische Moment der Erde berechnen, das nach dem Gedankengange von *Benfield* (1. c.) auftreten muss. Wir nehmen also nach der alten Auffassung über die Konstitution des Erdinnern an, dass die Erde einen sehr dichten aus geschmolzenen Schwermetallen und zwar hauptsächlich aus Eisen bestehenden »Kern« besitzt, der von einer noch grösstenteils metallischen »Zwischenschicht« umgeben ist. Nach einer neueren Auffassung sollte das Erdinnere grösstenteils aus »Sonnenmaterie« bestehen [13]. Wir wollen hier jedoch auf diese Frage nicht näher eingehen und bemerken nur, dass unser weiter unten besprochene Gedankengang mutatis mutandis auch auf diesen Fall anwendbar ist, da ja z. B. auch der Wasserstoff unter sehr hohem Druck metallische Eigenschaften annehmen muss [14].

Nehmen wir also an, dass die Erde einen Kern vom Halbmesser R_1 umgeben von einer Zwischenschicht vom Halbmesser R_2 besitzt und dass infolge des sehr grossen Druckes im Kern nach dem Gedankengange von *Benfield*

Leitungselektronen in die Zwischenschicht verdrängt werden. Einfachheit halber wollen wir weiter annehmen, dass die daraus folgende elektrische Dichte in beiden Erdschichten homogen ist und bezeichnen die positive Dichte im Erdkern mit ϱ_1 , und die negative in der Zwischenschicht mit ϱ_2 .

Zur Berechnung der elektrostatischen Energie dieses Gebildes benötigen wir zuerst das auftretende Potential als Funktion der Entfernung vom Erdmittelpunkt, die wir mit r bezeichnen. Von $r=0$ bis $r=R_1$ folgt bekannterweise

$$\begin{aligned} V_1(r) &= \frac{4r^3\pi}{3r} \varrho_1 + \int_r^{R_1} 4\pi \varrho_1 \frac{r'^3 dr'}{r'} + \int_{R_1}^{R_2} 4\pi \varrho_2 \frac{r'^3 dr'}{r'} \\ &= \frac{4r^2\pi}{3} \varrho_1 + 2\pi \varrho_1 (R_1^2 - r^2) + 2\pi \varrho_2 (R_2^2 - R_1^2) \end{aligned} \quad (25)$$

und von $r=R_1$ bis $r=R_2$

$$V_2(r) = \frac{4R_1^3\pi}{3r} \varrho_1 + \frac{4(r^3 - R_1^3)\pi}{3r} \varrho_2 + 2\pi \varrho_2 (R_2^2 - r^2). \quad (26)$$

Zur Berechnung der elektrostatischen Energie für den von $r=0$ bis $r=R_1$ reichenden Teil müssen wir (25) mit $4\pi r^2 dr \cdot \varrho_1$ multiplizieren und dann integrieren; bezeichnen wir diesen Teil der elektrostatischen Energie mit E_1 , dann folgt

$$E_1 = \frac{1}{2} \int V_1(r) \varrho_1 4\pi r^2 dr = \frac{16}{15} \pi^2 \varrho_1^2 R_1^5 + \pi \varrho_1 \varrho_2 (R_2^2 - R_1^2) \frac{4R_1^3\pi}{3}, \quad (27)$$

oder wenn wir mit $Q_1 = 4R_1^3\pi\varrho_1/3$ die ganze Ladung des Erdkernes bezeichnen

$$E_1 = \frac{3}{5} \frac{Q_1^2}{R_1} + \pi \varrho_2 (R_2^2 - R_1^2) Q_1. \quad (28)$$

Analog folgt für die elektrostatische Energie der in der von $r=R_1$ bis R_2 reichenden Kugelschale enthaltenen Ladung

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{1}{2} \int V_2(r) \varrho_2 4\pi r^2 dr = \frac{4}{3} \pi \varrho_1 \varrho_2 R_1^3 (R_2^2 - R_1^2) \\ &\quad + \frac{4\pi^2 \varrho_2^2}{15} (4R_2^5 + 6R_1^5 - 10R_1^3 R_2^3). \end{aligned} \quad (29)$$

Das erste Glied in (29) ist selbstverständlich mit dem zweiten in (27) gleich, das zweite (elektrostatische Energie der Zwischenschicht) können wir gleich angeben, wenn wir analog zu unserer Grösse Q_1 die Bezeichnungen

$$Q_1' = \frac{4R_1^3\pi}{3} \varrho_2 \quad \text{und} \quad Q_2 = \frac{4\pi}{3} (R_2^3 - R_1^3) \varrho_2 \quad (30)$$

führen. Es folgt dann für diese Energie

$$\frac{3}{5} \frac{(|Q'_1| + Q_2)^2}{R_2} - \frac{3}{5} \frac{Q_1'^2}{R_1} - 2\pi\varrho_2 (R_2^2 - R_1^2) |Q'_1|. \quad (31)$$

Setzen wir die in (30) definierten Grössen in (31) ein, so erhalten wir tatsächlich das zweite Glied von (29).

Ein weiteres Problem ist die Berechnung des von dieser Ladungsverteilung infolge der Erddrehung verursachten magnetischen Momentes. Zu diesem Zwecke wollen wir einfachheitshalber annehmen, dass $\varrho_1 = -\varrho_2$ ist, also dass die Ladungsdichte im Kern und in der Zwischenschicht nur ihrem Vorzeichen verschieden ist; wir bezeichnen ausserdem die Zahl der in der Volumeneinheit enthaltenen Elektronen bzw. Löcher mit n , also haben wir $\varrho_1 = -ne$ und $\varrho_2 = ne$. Für den von der Erddrehung durch eine Fläche von einem cm^2 in einer Entfernung d von der Erdachse verursachten Strom folgt dann

$$i = 2\pi d \frac{ne}{T}. \quad (32)$$

Dieser Strom erzeugt ein magnetisches Moment von der Grösse

$$\mu = \frac{if}{c} = \frac{2\pi^2 d^2}{c} \frac{ne}{T}. \quad (33)$$

Wenn wir d mit Hilfe von r ausdrücken, also $d = r \sin \theta$ setzen, so können wir (33) über eine Vollkugel integrieren

$$\begin{aligned} m_1 &= \int_0^\pi \int_0^R \mu r d\theta dr = \int_0^\pi \int_0^R \frac{2\pi^2 r^3 \sin^3 \theta}{c} \frac{ne}{T} r d\theta dr \\ &= \frac{4}{3} \frac{2\pi^2 ne}{cT} \frac{R^5}{5}. \end{aligned} \quad (34)$$

Analog folgt für eine Kugelschale

$$m_2 = \frac{4}{3} \frac{2\pi^2 ne}{cT} \frac{R_2^5 - R_1^5}{5} \quad (35)$$

und weiter für das ganze magnetische Moment

$$m = m_2 - m_1 = \frac{2\pi^2 ne}{cT} \frac{R_2^5 - R_1^5 - R^5}{5} \frac{4}{3}, \quad (36)$$

aus dem man n berechnen kann

$$n = \frac{15cT (m_2 - m_1)}{8\pi^2 e (R_2^5 - R_1^5 - R^5)}, \quad (37)$$

wenn das Moment m bekannt ist.

Zur numerischen Auswertung unserer Ergebnisse benützen wir die folgenden aus der geophysikalischen Literatur bekannten Zahlenangaben: Halbmesser des Erdkernes $R_1 = 3470$ km und Halbmesser der äusseren Grenze der Zwischenschicht gleich 5170 km. Da wir jedoch erstens angenommen haben, dass die Dichten der positiven und negativen Ladungsverteilungen nur ihrem Vorzeichen nach verschieden sind, und zweitens da die Erde im ganzen elektrisch neutral ist, so können wir diesen letzteren Halbmesser nicht einfach unserer Grösse R_2 gleichsetzen, sondern können die Zwischenschicht nur so weit vom Kern mit einer negativen Ladung versehen uns vorstellen, bis die positive Ladung des Kerns gerade kompensiert ist, also bis zu einer Kugelfläche, die das doppelte Volumen des Erdkernes enthält. Den Halbmesser der letzteren können wir dann mit unserer Grösse R_2 identifizieren. Aus der Berechnung folgt $R_2 = 4372$ km. Statt (37) haben wir dann

$$n = \frac{15cTm}{8\pi^2e(R_2^5 - 2R_1^5)}. \quad (38)$$

Mit Hilfe des bekannten magnetischen Momentes der Erde ($M = 7,9 \cdot 10^{25}$) folgt endlich für n :

$$n = 1,37 \cdot 10^7. \quad (39)$$

Weiter können wir jetzt, da infolge von (39) die elektrischen Dichten bekannt sind, die ganze elektrostatische Energie berechnen. Aus (28) und (29) folgt

$$E = E_1 + E_2 = \frac{3}{5} \frac{Q_1^2}{R_1} + 2\pi\varrho_2(R_2^2 - R_1^2)Q_1 + \frac{4\pi^2\varrho_2^2}{15} \left\{ 4R_2^5 + 6R_1^5 - 10R_1^3R_2^2 \right\}, \quad (40)$$

$$Q_1 = \frac{4R_1^2\pi}{3} \varrho_1, \quad \varrho_1 = -ne \quad \text{und} \quad \varrho_2 = ne \quad (41)$$

ist. Setzen wir alle unsere numerischen Ergebnisse in (40) ein, so folgt für die elektrostatische Energie

$$E = 5,46 \cdot 10^{38} \text{erg}. \quad (42)$$

Wir wollen jedoch noch unsere numerischen Berechnungen für ein anderes und physikalisch vielleicht noch mehr plausibles Modell durchführen. Wir nehmen selbstverständlich wieder an, dass der Erdkern eine positive Ladung besitzt, der angrenzende Teil der Zwischenschicht soll jedoch elektrisch neutral

und die negative Ladungsdichte soll in demselben nur von einem solchen Halbmesser an auftreten, dass zwischen der von diesem bestimmten Kugeloberfläche und der äusseren Grenze der Zwischenschicht gerade das Volumen des Erdkernes enthalten ist, damit das ganze Gebilde wieder elektrisch neutral ist. In (37) müssen wir dann die folgenden numerischen Werte einsetzen: R den Halbmesser des Erdkernes also $R = 3470$ km, für R_2 den äusseren Halbmesser der Zwischenschicht $R_2 = 5170$ km und endlich für R_1 den Wert 55 km. Aus (37) folgt dann

$$n = 6,96 \cdot 10^6. \quad (43)$$

Statt (40) müssen wir, wie leicht ersichtlich, jetzt die folgende Formel einsetzen

$$E = \frac{3}{5} \frac{Q^2}{R} + 2\pi \varrho_2 (R_2^2 - R_1^2) Q + \frac{4\pi^2 \varrho_1^2}{15} (4R_2^5 + 6R_1^5 - 10R_1^3 R_2^2), \quad (44)$$

$$Q = \frac{4R^2\pi}{3} \varrho_1 = -\frac{4R^2\pi}{3} ne \quad (45)$$

Die numerische Auswertung von (44) gibt

$$E = 2,33 \cdot 10^{38} \text{ erg.} \quad (46)$$

Im Vergleich von (39) und (43) bzw. (42) und (46) zeigt also, dass beide Methoden zu grössenordnungsmässig gleichen Resultaten führen.

Andererseits folgt für die Zahl der überschüssigen Elektronen bzw. der aus dem Erdkern entfernten Elektronen

$$N = \frac{4R^2\pi}{3} n = 2,20 \cdot 10^{23}. \quad (47)$$

Das Volumen, das ein Leitungselektron in einem Metall einnimmt [15], das Elektronenvolumen α , ist von der Grössenordnung 10^{-24} cm^3 und für die Druckdifferenz zwischen Erdkern und Zwischenschicht können wir die Grössenordnung $10^6 \text{ Atm} \sim \frac{10^{13} \text{ dyn}}{\text{cm}^2}$ annehmen. Multiplizieren wir mit diesen

Werten (47), so folgt für die Grössenordnung der im betrachteten Prozess frei gewordenen Gravitationsenergie

$$E_{\text{Grav}} \sim 10^{31} \text{ erg.} \quad (48)$$

Im Vergleich mit (42) bzw. (46) zeigt also gleich, dass, wenn wir auch annehmen

würden, dass die ganze bei dem betrachteten Prozess frei gewordene Gravitationsenergie nur in elektrostatische Energie verwandelt wird, auch dann die zur Verfügung stehende Gravitationsenergie zur Erklärung der Grösse des magnetischen Momentes der Erde noch um siebzehn Grössenordnungen zu klein wäre. Man könnte also das letztere mit Hilfe des in diesem Paragraphen besprochenen physikalischen Prozesses nur auf dem Wege erklären, dass man das Vorhandensein eines bis jetzt noch unbekannten besonderen Verstärkermechanismus annehmen würde.

§ 5. Wir kommen jetzt auf den im ersten, zweiten und dritten Paragraphen besprochenen neu hergeleiteten Zusammenhang zwischen Gravitation und magnetischem Moment zurück und wollen untersuchen, ob bei diesem Effekt nicht ein Verstärkermechanismus denkbar ist, mit Hilfe dessen man die Grössenordnung des magnetischen Momentes der Erde und der übrigen Himmelskörper erklären könnte.

Infolge des neuen Effektes tritt wegen des Gravitationsfeldes bei kondensierter Materie zwangsläufig eine kleine elektrische Polarisation auf. Andererseits gibt es eine Klasse von ferroelektrischen Körpern, bei denen tatsächlich der Polarisationszustand sich selbst aufrechterhält d. h. dass die Wechselwirkung der polarisierbaren Moleküle oder Atomgruppen so gross ist, dass eine einmal erzeugte Polarisation sich infolge der gegenseitigen Beeinflussung der in diesen Atomgruppen induzierten elektrischen Momente bis zu einem gewissen Sättigungszustand verstärkt, und demzufolge kleine Elementargebiete solcher Körper immer bis zur Sättigung polarisiert sind. Man kann jedoch sagen, dass feste Körper, welche diese Eigenschaft besitzen, eine Ausnahme sind. Andererseits ist zu bedenken, dass das elektrische Feld eines Dipols zur dritten Potenz der Entfernung umgekehrt proportional ist, und deshalb bei der Annäherung von solchen polarisierbaren Atomgruppen ihre Wechselwirkung mit abnehmender Entfernung sehr schnell wächst. Es wäre deshalb denkbar, dass bei unter sehr grossem Druck stehender Materie der von dem neuen Effekt zwangsweise gelieferte Polarisationszustand sich auf diesem Wege verstärken könnte, und das liefert eine neue Möglichkeit zur widerspruchsfreien Erklärung des erdmagnetischen Momentes.

Eine interessante Frage ist noch, wie gross die maximale relative Verschiebung des elektrischen Schwerpunktes der Elektronenachterschale und des übriggebliebenen positiven Ions sein müsste, um das erdmagnetische Moment erklären zu können. Aus (19) folgt für den maximalen Wert von l

$$l_0 = \frac{2M a g_0}{128 e^2}. \quad (49)$$

Dieses Resultat setzen wir in (20) ein

$$m = \frac{128el_0N\pi^2R_0^4}{15cT}. \quad (50)$$

Daraus kann man l_0 berechnen:

$$l_0 = \frac{15mcT}{128eN\pi^2R_0^4}. \quad (51)$$

Setzen wir in (51) für m das gemessene magnetische Moment der Erde und für alle anderen Grössen auf der rechten Seite die bekannten Werte ein, so folgt

$$l \sim \frac{1}{2} \cdot 10^{-8} \text{ cm.} \quad (52)$$

§ 6. Zum Schluss wollen wir noch die Frage besprechen, wie gross das magnetische Moment eines Atoms der »Erdmaterie« sein müsste, wenn wir als Gedankenexperiment annehmen würden, dass das erdmagnetische Moment eine Folge der untereinander parallel gerichteten Momente der einzelnen Atome ist. Zu diesem Zwecke wollen wir zuerst annehmen, dass jedes Atom der die Erde aufbauenden Materie gerade ein magnetisches Moment von der Grösse eines Kernmagnetons besitzt, und alle diese Momente untereinander parallel gerichtet sind. Dann folgt

$$m' = \frac{eh}{4\pi\mu c} \frac{4R_0^3\pi N}{3}, \quad (53)$$

wo jetzt μ die Masse eines Protons bedeutet, und alle anderen Symbole die in dieser Arbeit eingeführte Bedeutung haben, abgesehen von N , mit dem wir jetzt die durchschnittliche Zahl der Atome in 1 cm^3 Erdmaterie bezeichnen. Setzen wir $N \sim 0,7 \cdot 10^{23}$ in (53) ein, so folgt

$$m' \sim 25 \cdot 10^{25}. \quad (54)$$

Bekannterweise beträgt das magnetische Moment der Erde $7,9 \cdot 10^{25}$ elst. Einh., sodass wir rund den dreifachen Wert erhalten haben. Man könnte zwar denken, dass Atome, die tatsächlich ein magnetisches Kernmoment besitzen, nur einen geringen Bruchteil der materiellen Zusammensetzung der Erde ausmachen werden, weil ja in der Natur die Atomkerne mit gerader Protonen- und Neutronenzahl die am weitaus häufigsten sind. Das ist jedoch nicht so, weil das Al, das 8,1% des uns zugänglichen Teiles der Erdkruste ausmacht [16], ein Moment von +3,628 Kernmagnetonen besitzt [17], und das Na, das mit 2,75% vertreten ist, ein Kernmoment gleich +2,216 besitzt. Es ist sehr merkwürdig, dass man unter der Annahme, dass die ganze Erde

analog aufgebaut ist, für das magnetische Moment der Erde nicht nur einen grössenordnungsmässig richtigen Wert, sondern einen numerisch sehr guten nämlich $8,8 \cdot 10^{25}$ erhält. Das ist um so auffallender, weil die Berücksichtigung von allen anderen Möglichkeiten zur Erklärung des magnetischen Erdmomentes um viele Grössenordnungen zu kleine Ergebnisse liefert.

Andererseits ist gar keine physikalische Wechselwirkung denkbar, welche eine solche Art von Kernmoment-Ferromagnetismus bei normaler oder sogar hoher Temperatur erklären könnte. Eine mechanische Wechselwirkung zwischen der Erde als Kreisel und der Drehimpulse der Atomkerne wäre gegenüber der thermischen Energie viel zu klein, und die Parallelrichtung der Drehimpulse der Atomkerne zu dem der Erde würde auch ein unrichtiges Vorzeichen liefern, weil die erwähnten Kernmomente des Al und Na positiv sind.

Eine weitere Möglichkeit, an die man noch denken könnte, wäre die, dass bekannterweise die Wechselwirkung zwischen Kernmoment und Kristallgitter nur sehr gering ist, so dass theoretisch eine lange Relaxationszeit bei solchen Prozessen auftritt. Also wäre es vielleicht möglich, das erdmagnetische Moment als ein Überbleibsel der vergangenen geologischen Zeiten zu deuten, das noch nicht ganz abgeklungen ist. Doch sind dazu die theoretischen Relaxationszeiten immerhin zu klein. Waller [18] erhielt aus seinen Rechnungen für nichtmetallische feste Körper bei Zimmertemperatur 10^4 sec und bei 1°K 10^{17} sec für diese Relaxationszeiten. Dazu kommt noch, dass die tatsächlich gemessenen Relaxationszeiten noch viel kleiner sind und auch bei der Temperatur des flüssigen Heliums nur einige Sekunden betragen, wofür man ferromagnetische Verunreinigungen verantwortlich macht [19]. Drain [20] erhielt bei Zimmertemperatur Werte zwischen 0,1 und 0,005 sec.

LITERATUR

1. P. M. S. Blackett, *Nature*, **159**, 658 (1947) und *Phil. Mag.*, **40**, 125 (1949).
2. G. L. Clark, *Proc. Roy. Soc. A*, **201**, 488 (1950) und **201**, 510 (1950).
3. H. A. Wilson, *Proc. Roy. Soc. A*, **104**, 451 (1923).
4. A. Gião, C. R., **228**, 1203 (1949) und *Journ. d. Phys.*, **10**, 240 (1949).
5. G. K. Batchelor u. A. A. Townsend, *Proc. Roy. Soc. A*, **190**, 534 (1947) und G. K. Batchelor, ebenda **201**, 405 (1950).
6. H. Alfvén, *Ark. Mat. Astr. Fys.*, **29**, B. no. 2 und **29**, A. no. 12 (1943).
7. C. Walen, *Ark. Mat. Astr. Fys.*, **33**, A. No. 18 (1946).
8. E. C. Bullard, *Proc. Roy. Soc. A*, **197**, 433 (1949).
9. A. E. Benfield, *Phys. Rev.*, **75**, 211 (1949); *Nature*, **166**, 31 (1950). Vgl. hierzu H. P. Berleage, *Nature*, **165**, 242 (1950).
10. H. D. Babcock, *Astrophys. J.*, **105**, 105 (1947).
11. Sutherland, *Terr. Magn.*, **5**, 73 (1900); **8**, 49 (1903); **9**, 167 (1904) und **13**, 155 (1908).
12. S. Chapman u. H. Bartels, *Geomagnetism*, Oxford, 1940. S. 705.
13. W. Kuhn u. A. Rittmann, *Geol. Rundschau*, **32**, 215 (1941) und W. Kuhn, *Naturwiss.*, **30**, 689 (1942). Vgl. auch F. v. Wolff, *Stoff und Zustand im Inneren der Erde*, Nova Acta Leopoldina, Bd. 12. N. 87. Halle (Saale) 1943.
14. E. Wigner und H. B. Huntington, *Journ. Chem. Phys.*, **3**, 764 (1935).
15. Vgl. W. Biltz, *Raumchemie der festen Stoffe*, G. Voss, Leipzig, 1934. S. 206.

16. Vgl. z. B. E. B. Branson and W. A. Tarr : Introduction to Geology, 2. ed. McGraw-Hill Book Company, New-York and London, 1941. S. 6.
17. I. Matthauch und S. Flügge, Kernphysikalische Tabellen, Springer, Berlin, 1942.
- Tabelle I.
18. I. Waller, Zs. f. Phys., 79, 370 (1932).
19. J. Hatton und B. V. Rollin, Proc. Roy. Soc. A, 199, 222 (1949).
20. L. E. Drain, Proc. Phys. Soc. A, 62, 301 (1949).

НОВОЕ СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ТЯГОТЕНИЕМ И МАГНЕТИЗМОМ

Т. Нейгебауер

(Резюме)

В настоящей работе доказывается, что в случае конденсированного вещества электрический центр тяжести внешней электронной оболочки и остальной положительный ион под влиянием силы тяготения в каждом атоме немного перемещаются по отношению друг к другу. Поэтому, вследствие вращения небесного тела, должно создаваться магнитный момент. У небольших вращающихся тел центростремительная сила аналогичным образом создает магнитный момент. В противоположность эффекту Барнетта при котором создающийся в случае вращающегося шара магнитный момент пропорционален объёму и угловой скорости, у нового рода ротационного магнетизма эффект пропорционален третьей степени угловой скорости и пятой степени радиуса. У небесных тел этот эффект причиняемый тяготением, пропорционален массе небесного тела, гравитационному ускорению и радиусу. Для объяснения магнитного момента земли величина нового эффекта недостаточна, однако имеется возможность существования усилительного механизма, способного производить эффект желаемого порядка.

В последнем параграфе обсуждается поразительное численное согласие, ответственному которому получается, не только по порядку но с почти совершенной точностью, магнитный момент земли, если в роде мысленного эксперимента ставить параллельно магнитные моменты всех составляющих землю атомных ядер. Однако до сих пор не известна теоретическая возможность, подходящая для истолкования такого параллелизма.

ZU DEM PROBLEM DER NULLPUNKTSUNRUHE

Von

TH. NEUGEBAUER

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Vorgelegt von K. Novobátsky. — Eingegangen 5. IX. 1950.)

Nach einer Übersicht der Methoden, die es gestatten, das tatsächliche Vorhandensein der Nullpunktsschwingung zu verifizieren, wird die Frage besprochen, ob es sich dabei um eine gleichmässige Verschmiertheit oder ein tatsächliches Pendeln handelt; theoretische Erwägungen sprechen für die erstere Auffassung, doch hat man in neuerer Zeit versucht, einige sonst unverständliche experimentelle Resultate nach der letzteren zu deuten. Aus der Besprechung der Methoden, die es ermöglichen würden, diese Frage zu entscheiden, wird gefolgert, dass das beste diesbezügliche Verfahren die Messung der Depolarisation bei der Lichtzerstreuung des Methans ist. Es wird bewiesen, dass die relative grosse Kerrkonstante des Methans kein Orientierungs-, sondern ein Voigteffekt ist und man demzufolge aus dem Vorhandensein dieses Kerreffektes nicht den Schluss ziehen kann, dass das Methanmolekül auch einen relativ grossen Depolarisationsgrad bei der Lichtzerstreuung besitzen muss. Die Kerrkonstante kann also nicht als ein Beweis des Pendelns betrachtet werden.

Bekannterweise kann man das tatsächliche Vorhandensein der aus der Wellengleichung des harmonischen Oszillators folgenden Nullpunktenergie auf experimentellem Wege nur mit ziemlich grossen Schwierigkeiten verifizieren. Das rührt in erster Linie davon her, dass man immer nur Differenzen von Energien messen kann, und aus denen fällt die Nullpunktenergie selbstverständlich heraus. Man ist also auf andere Methoden angewiesen, und die zur Zeit besten diesbezüglichen Verfahren sind die röntgeninterferometrischen Messungen an festen Körpern. Das von einem Kristall verursachte Diffraktionsbild ändert sich zwar infolge des Vorhandenseins der Nullpunktunruhe nicht, die gestreuten Intensitäten werden jedoch geändert. Wenn man also den Atomformfaktor theoretisch kennt (z. B. die Ladungsverteilung nach dem Hartree'schen Verfahren berechnet), so muss dieser theoretische Atomformfaktor von dem aus den Messungsergebnissen berechneten etwas verschieden sein, weil ja die Nullpunktunruhe im Falle des letzteren die Ladungsverteilung in der Umgebung eines Atomkernes noch weiter verschmiert [1]. Anders gesagt drückt die bekannte Gleichung

$$fD = fe^{-M}, \quad (1)$$

in der $D = e^{-M}$ der Debyesche Temperaturfaktor ist, die scheinbare Änderung des Atomformfaktors infolge der thermischen Unruhe aus. M enthält dabei auch die Wirkung der Nullpunktsschwingung. Die sehr sorgfältigen Messungen

von *James, Brindley* und *Wood* [2] an Aluminiumkristallen haben tatsächlich das Vorhandensein der Nullpunktsunruhe eindeutig verifiziert. Analog wurde das Vorhandensein dieses Effektes von *James* und *Brindley* [3] bei *Sylvin*, von *Shonka* [4] an NaF , von *James, Waller* und *Hartree* [5] an NaCl und von *Rusterholz* [6] an Ag , Pt und Au nachgewiesen. Ausserdem deuten auch die an CCl_4 im Gaszustande durchgeführten Elektronendiffraktionsversuche von *Degard* und *van der Grinten* [7] auf das tatsächliche Vorhandensein der Nullpunktsschwingung hin.

Eine weitere diesbezügliche Methode wäre, die gemessenen Gitterkonstanten von festen Körpern mit den rein theoretisch berechneten zu vergleichen, weil die (positive) Nullpunktsenergie zu der (negativen) Gitterenergie algebraisch addiert werden muss, und das führt zu einer Vergrösserung der Gitterkonstante. Die Dynamik der Kristallgitter ist aber noch bei weitem nicht in der Lage, so genaue Resultate zu liefern, dass eine so kleine Differenz bemerkbar wäre [8]. Dieselbe Bemerkung bezieht sich auch auf die Messung und theoretische Berechnung von den Kerndistanzen der zweiatomigen Moleküle. Ebenso wäre es theoretisch möglich, durch einen Vergleich der berechneten und gemessenen Gitterenergie bzw. Dissoziationsenergie das tatsächliche Vorhandensein der Nullpunktsenergie zu beweisen.

Ein sehr interessanter Beweis für das tatsächliche Vorhandensein der Nullpunktsunruhe ist jedoch die schon sehr gut begründete Erfahrung, dass das He bei normalem Druck auch bei der tiefsten Temperatur nicht in den festen Zustand übergeführt werden kann, da in einem Edalgaskristall bloss von der Waalsche Kräfte die Kohäsion verursachen, die beim He gegenüber der Nullpunktsenergie nicht mehr im Stande sind, ein festes Gitter zusammenzuhalten. Nur unter sehr hohem Druck kann das flüssige Helium in einen Zustand übergeführt werden, der in einem gewissen Sinne als »fest« bezeichnet werden kann, wie das eben die neuesten Versuchsergebnisse zeigen. Weitere Methoden, wie die z. B. aus der Bandenspektroskopie gewonnenen, sind nur viel weniger zuverlässig.

Eine weitere interessante Frage bezüglich dieses Problems ist, ob es sich bei der Nullpunktsschwingung um ein »tatsächliches« »Pendeln« handelt oder ob bloss eine »Verschmiertheit« auftritt. Theoretische Erwägungen sprechen entschieden zugunsten der letzteren Auffassung, da man jedoch versucht hat, einige experimentelle Erfahrungen mit Hilfe der ersteren zu deuten, so soll deshalb diese Frage hier eingehender besprochen werden. Die erwähnten Beweise für das tatsächliche Vorhandensein der Nullpunktsschwingung geben bezüglich der jetzt besprochenen Frage keine eindeutige Entscheidung, weil bei ihnen sowieso nur Mittelwerte gemessen werden. Der Annahme von einem Pendeln spricht jedoch der Umstand sehr entgegen, dass Dipolmoleküle unter dieser Annahme ihre Nullpunktsenergie korrespondenzmässig ausstrahlen müssten.

Andererseits könnte man hier zur Entscheidung die Theorie der Lichtzerstreuung und des elektrischen Widerstandes der festen Körper heranziehen. Bekannterweise würden ideale Kristallgitter überhaupt kein Licht streuen und im Falle der Metalle auch keinen elektrischen Widerstand besitzen, beide Erscheinungen werden nur von den Wärmeschwingungen der Gitterelemente und von Verunreinigungen und Gitterfehlern verursacht. Sieht man also von den letzteren ab, so bleibt als alleinige Ursache der beiden erwähnten Erscheinungen die thermische Unruhe übrig, welche die ideale Ordnung im Gitter zerstört. Fasst man also in diesem Falle die Nullpunktsschwingung als total verschmiert auf, so verursacht sie keine Unordnung im Kristallgitter, sondern bloss eine (kleine) Verschmiertheit der Gitterpunkte. Nach dieser Auffassung verschwinden also beide Erscheinungen am absoluten Nullpunkt. Würde es sich jedoch um ein tatsächliches Pendeln handeln, so wäre die ideale Ordnung auch infolge der Nullpunktsschwingung zerstört und demzufolge müsste am absoluten Nullpunkt ein endlicher Restwiderstand und eine endliche Reststreuung übrig bleiben. Es wäre jedoch sehr schwierig, in diesen Fällen eine experimentelle Entscheidung zu treffen. Die Lichtzerstreuung wird in solch einem Masse von Verunreinigungen verursacht, dass es sogar bei normaler Temperatur nicht leicht ist, die Wirkung der Wärmeschwingungen zu messen. Analog wäre es auch sehr schwierig, im Falle des elektrischen Widerstandes eine experimentelle Entscheidung heranzuziehen, der Effekt müsste zwar ziemlich gross sein, die quantenmechanische Theorie des Widerstandes ist jedoch grösstenteils nur qualitativ, wozu auch die bis jetzt noch ungelöste Frage der Supraleitung hinzukommt.

Eine Methode zur Entscheidung der hier besprochenen Frage liefert jedoch die Messung der Lichtzerstreuung von kugelsymmetrischen Molekülen. Bezeichnen wir nämlich die Hauptpolarisierbarkeiten eines Moleküls mit b_1 , b_2 und b_3 , so folgt für den Depolarisationsgrad bei der Lichtzerstreuung die bekannte Formel [9]

$$\Delta = \frac{I_s}{I_r} = \frac{2(b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 - b_1 b_2 - b_2 b_3 - b_3 b_1)}{4(b_1^2 + b_2^2 + b_3^2) + b_1 b_2 + b_2 b_3 + b_3 b_1}. \quad (2)$$

Da bei kugelsymmetrischen Molekülen $b_1 = b_2 = b_3$ ist, so verschwindet Δ , das gestreute Licht ist also nicht depolarisiert. Berücksichtigen wir jedoch die Nullpunktsschwingung, so bleibt, solange man die als vollständig verschmiert betrachtet, das fragliche Molekül exakt kugelsymmetrisch und demzufolge $\Delta = 0$. Handelt es sich jedoch um ein tatsächliches Pendeln, so ist infolge dieser Bewegung die Kugelsymmetrie in jedem Augenblick ein wenig zerstört, und die Depolarisation verschwindet demzufolge nicht. Ein ideales Gas zur experimentellen Entscheidung dieser Frage ist das Methan. Die Schwingungsfrequenzen dieses Moleküls liegen nämlich infolge der kleinen Masse der Wasserstoffatome

so hoch, dass bei normaler Temperatur eigentlich nur die Nullpunktsunruhe übrig bleibt. Tatsächlich deuten die meisten Messungen darauf hin, dass die doch vorhandene sehr kleine Depolarisation des gestreuten Lichtes ausser von dem Ramaneffekt bloss von Verunreinigungen und unvermeidlichen experimentellen Unvollkommenheiten herrührt. Viel weniger geeignet zur Entscheidung dieser Frage wäre das CCl_4 , das infolge der grossen Masse der Chloratome sehr niedrige Wärmeschwingungen besitzt, die schon bei normaler Temperatur recht bemerkbar angeregt sind. Tatsächlich hat man bei diesem Gas eine messbare Depolarisation des gestreuten Lichtes festgestellt.

Andererseits hat man versucht, den beim CH_4 von einigen Autoren gemessenen grösseren Depolarisationsgrad auf ein tatsächliches Pendeln zurückzuführen, und interessanterweise spricht für diese Auffassung der bekannte Zusammenhang zwischen Depolarisationsgrad und elektrooptischer Kerrkonstante, der aus der molekularen Orientierungstheorie folgt. Nach ihr ist nämlich [9]

$$K = \frac{3}{2kT} \cdot \frac{(n_\infty - 1)(n - 1)}{\pi N} \cdot \frac{\Delta}{6 - 7\Delta} \quad (3)$$

und für die Kerrkonstante K von dipollosen Molekülen folgt nach dieser Theorie [9]

$$K = \frac{n_x - n_z}{n} \cdot \frac{1}{E^2} = \frac{\pi N}{15kT} \left\{ (a_1 - a_2)(b_1 - b_2) + (a_1 - a_3)(b_1 - b_3) + (a_2 - a_3)(b_2 - b_3) \right\}, \quad (4)$$

wo a_1 , a_2 und a_3 die statischen Hauptpolarisierbarkeiten sind, und die übrigen Symbole alle die gewohnte Bedeutung haben. Eine gut begründete experimentelle Tatsache ist nun, dass das Methan eine endliche Kerrkonstante und zwar von der Grössenordnung der nichtpolaren, jedoch nicht kugelsymmetrischen Moleküle besitzt. Nach (3) würde also daraus ein endlicher Depolarisationsgrad folgen, was ein weiterer Beweis für das tatsächliche Pendeln bei der Nullpunktschwingung wäre.

Nach (4) verschwindet die Kerrkonstante ebenso wie der Depolarisationsgrad von streng kugelsymmetrischen Molekülen. Die Messung der Kerrkonstante ist jedoch zur Entscheidung der Frage, ob ein Molekül kugelsymmetrisch ist, bei weitem nicht so geeignet wie die des Depolarisationsgrades, weil einen Kerreffekt ausser das aus der Orientierungstheorie folgende Anisotropieglied (4) auch noch eine Erscheinung verursacht, die der ursprünglichen Voigtschen Theorie des Kerreffektes [10] entspricht. Dieser Voigtanteil des Kerreffektes ist jedoch um zwei Grössenordnungen kleiner als das Anisotropieglied.

Schätzt man die aus der Quantenmechanik hergeleiteten Grössenordnungen des Anisotropiegliedes

$$K_A = \frac{4\pi N}{h S_0 \bar{n}^2} \sum_{jm} e^{-\frac{W_0 nj}{kT}} \frac{1}{kT} \sum_{n' \neq n} \frac{|P_{0z}(njm; n'j'm)|^2}{h \nu(n'j'; nj)}$$

$$\left\{ \sum_{n'j'} \frac{\nu_0(n'j'; nj) |P_{0z}(njm; n'j'm)|^2}{\nu_0^2(n'j'; nj) - \nu^2} \sum_{n'j'm'}^{\sigma} \frac{\nu_0(n'j'; nj) |P_{0z}(njm; n'j'm')|^2}{\nu_0^2(n'j'; nj) - \nu^2} \right\}, \quad (5)$$

wo die $\nu(n'j'; nj)$ Frequenzen, die $P(njm; n'j'm')$ die dazugehörenden Übergangsmomente bedeuten, und die übrigen Buchstaben die gewohnte Bedeutung haben, und des Voigtanteils

$$\begin{aligned} K_V = & \frac{4\pi N}{h S_0 \bar{n}^2} \sum_s e^{-\frac{W_{0s}}{kT}} \left\{ - \left[\sum_{s'} \frac{(\nu_0^2(s's) + \nu^2) \nu_s(s's) |P_{0z}(ss')|^2}{(\nu_0^2(s's) - \nu^2)^2} - \right. \right. \\ & - \sum_{s'}^{\sigma} \frac{(\nu_0^2(s's) + \nu^2) \nu_s(s's) |P_{0z}(ss')|^2}{(\mu^2(s's) - \mu^2)^2} \left. \right] \\ & + \left[\sum_{s'} \frac{\nu_0(s's) \{ P_{0z}(ss') P_{2z}(s's) + P_{0z}(s's) P_{2z}(ss') \}}{\nu_0^2(s's) - \nu^2} - \right. \\ & \left. \left. - \sum_{s'}^{\sigma} \frac{\nu_0(s's) \{ P_{0z}(ss') P_{2z}(s's) + P_{0z}(s's) P_{2z}(s's) \}}{\nu^2(s's) - \nu^2} \right] \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

(wo wir zur Vereinfachung der Schreibweise statt den Quantenzahlen njm einfach s geschrieben haben) beim Kerreffekt von dipollosen Molekülen ab [11], so würde unter Berücksichtigung des Umstandes, dass in der Reihenentwicklung von $P(ss')$

$$P(ss') = P_0(ss') + P_2(ss') E^2 \quad (7)$$

man bekannterweise für $P_2(ss')$ nach der Störungstheorie

$$\begin{aligned} P_{2z}(ss') = & \sum_{s''s'''} \frac{P_{0z}(ss'') P_{0z}(s''s''') P_{0z}(s'''s')}{h^2 \nu(s''s') \nu(s'''s')} - \sum_{s''s'''} \frac{P_{0z}(ss''') P_{0z}(s'''s'') P_{0z}(s''s')}{h^2 \nu(ss'') \nu(ss''')} \\ & - \sum_{s''} \frac{P_{0z}(ss'') P_{0z}(s''s') P_{0z}(s's')}{h^2 \nu^2(s's')} + \sum_{s''} \frac{P_{0z}(ss'') P_{0z}(s''s'') P_{0z}(s's')}{h^2 \nu^2(ss'')} \\ & + \sum_{s''s'''} \frac{P_{0z}(ss'') P_{0z}(s''s''') P_{0z}(s'''s')}{h^2 \nu(ss'') \nu(s'''s')} - \sum_{s''s'''} \frac{P_{0z}(ss'') P_{0z}(s''s''') P_{0z}(s'''s')}{h^2 \nu(ss'') \nu(s'''s')} \end{aligned} \quad (8)$$

erhält, folgen, dass das Anisotropieglied und das Voigtsche Glied von derselben Grössenordnung sind. Der grosse Wert für den Voigtanteil ist eine Folge davon, dass zwar bei dipollosen Molekülen die zu reinen Rotationsübergängen gehörenden Übergangsmomente $P_0(ss')$ verschwinden, in (8) treten jedoch in der ersten Zeile Glieder auf, bei denen im Nenner reine Rotationsfrequenzen stehen, ohne dass solche Übergangsmomente im Zähler auftreten würden, und da diese Rotationsfrequenzen um zwei Grössenordnungen kleiner als die Frequenzen der Elektronenbanden sind, so folgt daraus scheinbar der grosse Wert des Voigtschen Gliedes. Berücksichtigt man jedoch den spektroskopischen Stabilitätssatz [12] im zweiten Gliede von (6) nach dem

$$\sum_{mm'} |f(nm; n'm')|^2 = \sum_{mm'} |f_0(nm; n'm')|^2 \quad (9)$$

ist, bzw. setzt $f = P$, so folgt daraus, dass dieser grosse Wert nur vorgetäuscht sein kann. Tatsächlich kann man mit Hilfe einer Transformation, entsprechend der Behandlung des Falles der angenäherten Entartung nach der Schrödingerschen Störungstheorie erreichen, dass in (8) in den Nennern nur mehr Frequenzen der Oszillations- und Elektronenbanden auftreten [11] und daraus folgt, dass das Voigtsche Glied tatsächlich um zwei Grössenordnungen kleiner ist, als das Anisotropieglied.

Um also das Auftreten eines grossen Voigtschen Gliedes beim CH_4 erklären zu können, muss irgendwie der Beweis erbracht werden, dass im Falle dieses Moleküls der spektroskopische Stabilitätssatz nicht mehr anwendbar ist, weil man ja sonst tatsächlich gezwungen wäre, die Nullpunktsunruhe als ein tatsächliches Pendeln aufzufassen. Wie wir schon erwähnt haben, besitzen die Eigenschwingungen des Methans wegen der geringen Masse der Wassers off-atome alle eine relativ hohe Energie, ausserdem müssen ebenfalls wegen der erwähnten kleinen Masse die Schwingungen eine sehr grosse Amplitude besitzen, und demzufolge sind die Schwingungen schon stark anharmonisch. Dieser ohne Schwierigkeit in die Quantenmechanik übertragbare klassische Gedankengang erklärt es ohne weiteres, dass der spektroskopische Stabilitätssatz beim Methan nicht mehr gültig ist, also ein relativ grosses Voigtsches Glied beim Kerreffekt auftritt, das man ja tatsächlich beobachtet hat. Der experimentelle Beweis für das tatsächliche Auftreten von einem Pendeln bei der Nullpunktsunruhe ist also nur vorgetäuscht.

Vollständigkeitshalber wollen wir nur noch erwähnen, dass ein kugelsymmetrisches Molekül ein endliches Anisotropieglied beim Kerreffekt nicht einmal dann besitzen könnte, wenn es sich bei der Nullpunktsschwingung um ein tatsächliches Pendeln handeln würde. Die Einstellung eines Moleküls im konstanten elektrischen Felde wird nämlich jedenfalls eine Zeitdauer benötigen, die von der Dauer eines Rotationsumlaufes ist. Die Schwingungsfrequenzen

сind jedoch um zwei Grössenordnungen grösser als die Rotationsfrequenzen, und demzufolge hat ein Molekül während einer Schwingungsphase keine Zeit sich einzustellen, ein Orientierungseffekt kann also nicht zustande kommen. Bei der Lichtzerstreuung ist es selbstverständlich anders, weil es dort keine Einstellung gibt und das Molekül demzufolge in jeder Schwingungsphase augenblicklich auf das schnell alternierende Feld der Lichtwelle reagieren würde.

LITERATUR

1. Vgl. M. v. Laue, Röntgenstrahlinterferenzen, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1941. S. 185, 201 u. 227.
2. R. W. James, G. W. Brindley und R. G. Wood, Proc. Roy. Soc. A, **125**, 401 (1929).
3. R. W. James u. G. W. Brindley, Proc. Roy. Soc. A, **121**, 155 (1928).
4. J. J. Shonka, Phys. Rev., **43**, 947 (1933).
5. R. W. James, I. Waller und D. R. Hartree, Proc. Roy. Soc. A, **118**, 334 (1928).
6. A. Rusterholz, Diss. Zürich, 1931.
7. C. Degard, J. Piérard und W. van der Grinten, Nature, **136**, 142 (1935); C. Degard u. W. van der Grinten, IIe Congrès National des Sciences, Bruxelles, 1935. S. 653.
8. Th. Neugebauer und P. Gombás, Zs. f. Phys., **89**, 480 (1934).
9. Vgl. z. B. H. A. Stuart, Molekülstruktur, J. Springer, Berlin, 1934. S. 172, 203 u. 205.
10. W. Voigt, Magneto- und Elektrooptik, B. G. Teubner, Leipzig, 1908.
11. Th. Neugebauer, Zs. f. Phys., **82**, 660 (1933) u. **86**, 392 (1933).
12. Vgl. z. B. J. H. van Vleck, Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities, University Press, Oxford, 1932. S. 139.

ПРОБЛЕМА ДВИЖЕНИЯ НУЛЕВОЙ ТОЧКИ

Т. Нейгебауер
(Резюме)

После изложения методов, делающих возможной экспериментальную проверку существования движения нулевой точки, обсуждается вопрос о том, означает ли это движение только стирание места, или же оно действительное колебательное движение. Теоретические рассуждения поддерживают первое мнение, однако в новейшее время велись попытки толкования до сих пор не объяснимых явлений на основе второго гипотеза. Из обсуждения методов, которые делали бы возможным решение проблемы, делается вывод, что наилучшим способом для этого является, измерение деполаризации при рассеянии света у молекулы метана. Дальше доказывается что сравнительно большая постоянная Керра у метана имеет характер ориентационного эффекта а не эффекта Воигта, и поэтому из существования этого эффекта Керра не возможно заключить, что молекула метана должна производить и сравнительно большую деполаризацию при рассеянии света. Таким образом, постоянную Керра невозможно считать доказательством того, что движение нулевого пункта является действительным колебательным движением.

SOME INVESTIGATIONS IN THE FIELD OF THE THEORY OF SOLIDS.

II. LINEAR CHAIN OF DIFFERENT ATOMS. BINARY SYSTEMS

By

T. A. HOFFMANN

PHYSICAL INSTITUTE OF THE TECHNICAL UNIVERSITY, BUDAPEST

(Presented by P. Gombás. — Received 13. XII. 1950.)

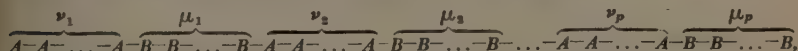
In this paper a linear chain is treated which is built up of different atoms of two kinds. A general treatment is given for the case of binary systems regardless of the number of the various atoms. Formulae are given for the calculations in the case of an ordered linear alloy of this binary type. Closer investigations have been made for the types A-B-A-B, A-A-B, A-A-B-B and A-A-A-B with and without neglected overlap integrals.

1. Introduction

In the first part of this series [1] there was a detailed discussion of the properties of a linear chain consisting of atoms of the same kind with one valence electron on the basis of the LCAO approximation of the MO method. In the present paper we extend these investigations to some cases in which the chain is constituted of atoms of different kinds.

We shall investigate the case in which atoms of different kinds are present in approximately the same numbers (especially ordered alloys). The case in which one of the atoms is present only to a very small extent (impurities, adhesion) will be published in the next paper of this series. We only pay attention to the case of a great number of atoms, i. e. an infinite crystal; however, end effects can be treated in a similar way as in [1].

Let us consider a binary system in which there is a strict order in such a way that there is a strict periodicity in the localization of the atoms. One period should consist of $\nu + \mu$ atoms as is shown by the following scheme.



where

$$\nu = \sum_{i=1}^p \nu_i \quad \text{and} \quad \mu = \sum_{i=1}^p \mu_i \quad (1.1)$$

We suppose that this period is an elementary one, i. e. we cannot find a period with less than $\nu + \mu$ atoms.

If we suppose that there are n periods in the whole system, we obtain a secular determinant of $n(\nu + \mu)$ rows and columns (see [1], (3.1)).¹

We shall give a general method for solving this secular equation in the case

$$\nu \geq 2, \mu \geq 2.$$

If either ν , or μ , or both are less, than 2, we must investigate the case separately. So we first consider these exceptional cases.

1. Alloys of $A - B$ type. $S = 0$.

Here one period consists of two atoms, one A and one B . First we neglect the overlap integrals, i. e. we take $S = 0$. The Coulomb integrals defined in [1], (2.11) will be denoted by Q_A and Q_B for atom A and B respectively and the exchange integral between an A atom and an adjacent B atom defined in [1], (2.10) by β .

We define further

$$x = \frac{Q_A - E}{\beta} \quad \text{and} \quad y = \frac{Q_B - E}{\beta}, \quad (2.1)$$

where E is the energy of the system. We take into account only the effect of nearest neighbours.

So the secular equation is after dividing each row by β

$$\Delta_{2n} = \begin{vmatrix} (1) & x & 1 & & & \\ (2) & 1 & y & 1 & & \\ (3) & & 1 & x & 1 & \\ (4) & & & 1 & y & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & \\ (2n-1) & & & & & x & 1 \\ (2n) & & & & & 1 & y \end{vmatrix} = 0. \quad (2.2)$$

¹ We fallaciously denote the determinant equation »secular equations« in the case of dissimilar atoms, since in this case we cannot use the method of degenerate perturbation because of the various unperturbed energies of the different atoms. However, our method of the determinant equation is valid in another sense. Namely we use a variational method with the trial eigenfunction

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_n \psi_n,$$

where ψ_i denotes the eigenfunction of an electron on the i -th free atom. We get for the determination of the least value of E the same determinant equation as in degenerate perturbation calculations. We use our method in the case of dissimilar atoms in this sense.

We define an operator, Ω , which reduces the index of Δ by 2:

$$\Omega \Delta_k = \Delta_{k-2} . \quad (2.3)$$

So we have the following recursion formulae:

$$\left. \begin{aligned} \Delta_{2n} &= x \Delta_{2n-1} - \Omega \Delta_{2n} , \\ \Delta_{2n-1} &= y \Omega \Delta_{2n} - \Omega \Delta_{2n-1} . \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

These can be written in the form

$$\left. \begin{aligned} (1 + \Omega) \Delta_{2n} - x \Delta_{2n-1} &= 0, \\ y \Omega \Delta_{2n} + (1 + \Omega) \Delta_{2n-1} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

as a system of homogeneous linear equations which has a non-trivial¹ solution if

$$\begin{vmatrix} 1 + \Omega & -x \\ -y\Omega & 1 + \Omega \end{vmatrix} = 0, \quad (2.6)$$

i. e. a quadratic equation for Ω ,

$$1 + (2 - xy)\Omega + \Omega^2 = 0 . \quad (2.7)$$

Now we define the generating function

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_{2n} t^n . \quad (2.8)$$

Applying (2.7) and (2.3) to (2.8) we have

$$[1 + (2 - xy)t + t^2]f(t) = \Delta_0 [1 + (2 - xy)t] + \Delta_2 t . \quad (2.9)$$

(2.2) gives immediately

$$\Delta_0 = 1 \quad \text{and} \quad \Delta_2 = xy - 1 . \quad (2.10)$$

Introducing (2.10) into (2.9) we get for the generating function

$$f(t) = \frac{1 + t}{1 + (2 - xy)t + t^2} . \quad (2.11)$$

By expanding (2.11) into partial fractions, we have

$$f(t) = \frac{K}{1 - \frac{t}{t_1}} + \frac{L}{1 - \frac{t}{t_2}} , \quad (2.12)$$

where t_1 and t_2 are the roots of the equation (2.7) and K and L can be determined from (2.11) and (2.12):

$$K = \frac{1 + t_2}{t_2 - t_1} \quad \text{and} \quad L = -\frac{1 + t_1}{t_1 - t_2} . \quad (2.13)$$

¹ A trivial solution would be $\Delta_{2n} = 0$ and $\Delta_{2n-1} = 0$ simultaneously, which would give all $\Delta_k = 0$, an obvious contradiction.

Now (2.12) gives expanding it in a power series in t and comparing with (2.8):

$$\Delta_{2n} = \frac{t_2^n - t_1^n}{t_2 - t_1} + \frac{t_2^{n+1} - t_1^{n+1}}{t_2 - t_1}. \quad (2.14)$$

From (2.7) we can see, that

$$t_1 t_2 = 1. \quad (2.15)$$

Thus we can define a ξ by

$$t_1 = e^{-i\xi} \quad t_2 = e^{i\xi}. \quad (2.16)$$

Equation (2.2) can now be written, taking into account (2.14) and (2.16)

$$\frac{\sin n\xi}{\sin \xi} + \frac{\sin (n+1)\xi}{\sin \xi} = 0. \quad (2.17)$$

The solutions of this equation are

$$\xi = \frac{2k\pi}{2n+1}, \quad (k = 1, 2, \dots, n), \quad (2.18)$$

the values for $k = n+1, n+2, \dots, 2n$ do not give other roots than those (in (2.18)).

From (2.7) and (2.16) we have

$$2 - xy = -(t_1 + t_2) = -2\cos \frac{2k\pi}{2n+1}, \quad (k = 1, 2, \dots, n). \quad (2.19)$$

This is a quadratic equation for E , if we introduce here (2.1):

$$E^2 - (Q_A + Q_B)E + Q_A Q_B - 4\beta^2 \cos^2 \frac{k\pi}{2n+1} = 0, \quad (k = 1, 2, \dots, n). \quad (2.20)$$

One can see immediately that this equation has no double roots whatever be the values Q_A, Q_B and β . (2.20) gives all the $2n$ roots of equation (2.2).

If we consider the case in which n tends to infinity, one can with (2.18) take ξ as a continuous variable in the range $(0, \pi)$. This means that now the energy terms, which were separated in the case n finite, practically cannot be taken discrete. Thus we have energy bands instead of discrete energy terms.

If we construct the (E, ξ) diagram (taking ξ from (2.18) into (2.19)). we see that in the interval $(0, \pi)$ each value of ξ has two separate E values which belong to separate bands. The band edges can be calculated from the quadratic equation if we there take $\xi = 0$ and $\xi = \pi$. For $\xi = 0$ this gives $E = Q_A$ and $E = Q_B$.

The (E, ξ) diagram and the band structure in this case is shown in fig. 1.

It is obvious that the energy gap between the two bands is $Q_A - Q_B$ i. e. roughly the difference in the ionization energy of the two atoms. The

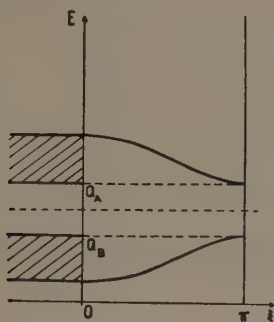


Fig. 1. E - ξ diagram and the band-structure for an A - B type alloy. ($Q_B < Q_A$).

width of the bands is besides this a function of β . The two bands are placed symmetrically to the value $\frac{Q_A + Q_B}{2}$.

The energy level density is in this case (not normalized):

$$D = \left| \frac{d\xi}{dE} \right| = \frac{\left| \frac{Q_A + Q_B}{2} - E \right|}{\sqrt{(E - Q_A)(E - Q_B) \left[\beta^2 - \frac{(E - Q_A)(E - Q_B)}{4} \right]}}. \quad (2.21)$$

This distribution of states is shown in fig. 2 as a function of E .

According to the Pauli-principle each term can be filled by two electrons. Thus the lower band will be filled up at absolute zero and the higher band will be empty. This means, for instance, that there is no conduction in such an alloy, or the chain behaves like a semi-conductor with the activation energy $Q_A - Q_B$, if this difference is small.

The average energy pro electron can be obtained by evaluating the expression

$$\bar{E} = \frac{\int_{E_1}^{E_2} E D(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} D(E) dE} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi E d\xi, \quad (2.22)$$

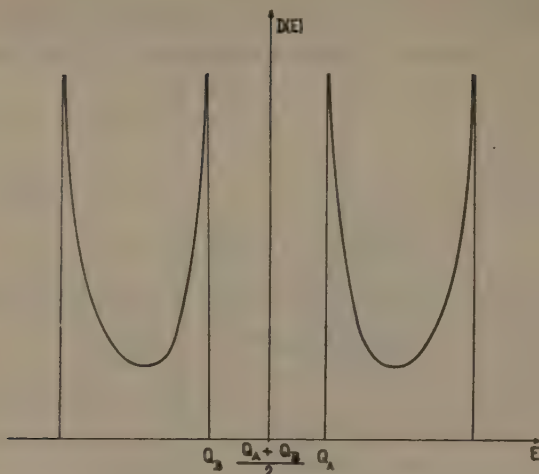


Fig. 2. Density of states in an $A-B$ type alloy if $S = 0$.

where the integration extends to the lower band both in the numerator and in the denominator, i. e. from

$$E_1 = \frac{Q_A + Q_B}{2} - \sqrt{\left(\frac{Q_A - Q_B}{2}\right)^2 + 4\beta^2},$$

to

$$E_2 = Q_B.$$

The evaluation of the integral gives the average energy pro electron

$$\bar{E} = \frac{Q_A + Q_B}{2} - \frac{2}{\pi} \sqrt{\left(\frac{Q_A - Q_B}{2}\right)^2 + 4\beta^2} E \left[\frac{-2\beta}{\sqrt{\left(\frac{Q_A - Q_B}{2}\right)^2 + 4\beta^2}} \right],$$

where $E(k)$ is the complete elliptic normal integral of the second kind with argument k [2].

If we introduce the ratio

$$r = \left| \frac{Q_A - Q_B}{4\beta} \right|, \quad (2.24)$$

the average energy is

$$\bar{E} = \frac{Q_A + Q_B}{2} + \frac{4\beta}{\pi} \sqrt{1 + r^2} E \left(\frac{1}{\sqrt{1 + r^2}} \right), \quad (2.25)$$

showing that, if we consider the cases in which β is the same, the binding is the stronger the larger the difference in ionization energies.

Similarly, if we consider the cases in which $Q_A - Q_B$ is the same, taking

$$q = \frac{1}{r} = \left| \frac{4\beta}{Q_A - Q_B} \right|, \quad (2.26)$$

we have

$$\bar{E} = \frac{Q_A + Q_B}{2} - \frac{Q_A - Q_B}{2} \sqrt{1 + q^2} E\left(\frac{q}{\sqrt{1 + q^2}}\right), \quad (2.27)$$

so that in this case the stronger the binding energy the larger is $|\beta|$.

The functions $\sqrt{1 + x^2} E\left(\frac{1}{\sqrt{1 + x^2}}\right)$ and $\sqrt{1 + x^2} E\left(\frac{x}{\sqrt{1 + x^2}}\right)$ are shown in fig. 3.

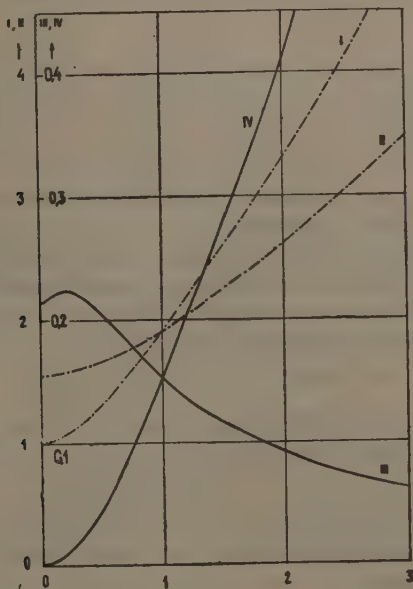


Fig. 3.

$$I = \sqrt{1 + x^2} E\left(\frac{1}{\sqrt{1 + x^2}}\right)$$

$$III = I - \frac{\pi}{4} \sqrt{1 + 4x^2}$$

$$II = \sqrt{1 + x^2} E\left(\frac{x}{\sqrt{1 + x^2}}\right)$$

$$IV = II - \frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \frac{x^2}{4}}$$

The binding energy against dissociation into atoms is per electron :

$$\begin{aligned} \left| \bar{E} - \frac{Q_A + Q_B}{2} \right| &= \frac{4|\beta|}{\pi} \sqrt{1+r^2} E \left(\frac{1}{\sqrt{1+r^2}} \right) = \\ &= \frac{|Q_A - Q_B|}{\pi} \sqrt{1+q^2} E \left(\frac{q}{\sqrt{1+q^2}} \right). \end{aligned} \quad (2.28)$$

This binding energy is represented in fig. 3 without the factors $\frac{4}{\pi} |\beta|$ and $\frac{|Q_A - Q_B|}{\pi}$.

The binding energy against dissociation into molecules of the type $A - B$ is

$$\begin{aligned} \left| \bar{E} - \frac{Q_A + Q_B}{2} + \sqrt{\left(\frac{Q_A - Q_B}{2} \right)^2 + \beta^2} \right| &= \\ &= \frac{4}{\pi} |\beta| \left[\sqrt{1+r^2} E \left(\frac{1}{\sqrt{1+r^2}} \right) - \frac{\pi}{4} \sqrt{1+4r^2} \right] = \\ &= \frac{|Q_A - Q_B|}{\pi} \left[\sqrt{1+q^2} E \left(\frac{q}{\sqrt{1+q^2}} \right) - \frac{\pi}{2} \sqrt{1+\frac{q^2}{4}} \right], \end{aligned} \quad (2.29)$$

which is shown in fig. 3, the factors before the square brackets being omitted.

The curve III has a maximum at $x = 0.218 \dots$. This means that if we consider the cases in which $|\beta|$ is the same, there is a value for $|Q_A - Q_B|$ for which the binding against dissociation into molecules is the most stable. There is no such maximum in the curve IV, so that if we take $|Q_A - Q_B|$ as constant, we cannot conclude the same for $|\beta|$.

3. Alloys of $A - B$ -type. $S \neq 0$.

The equations (2.2)–(2.19) remain unaltered in the case $S \neq 0$, only the definitions (2.1) are changed to

$$x = \frac{Q_A - E}{\beta - SE} \quad \text{and} \quad y = \frac{Q_B - E}{\beta - SE}, \quad (3.1)$$

where S is the overlap integral between an A atom and an adjacent B atom as defined in [1], (2.15).

(2.19) and (2.18) gives now with (3.1) the equation for E :

$$\begin{aligned} \left\{ 1 - 4S^2 \cos^2 \frac{\xi}{2} \right\} E^2 - \left\{ Q_A + Q_B - 8\beta S \cos^2 \frac{\xi}{2} \right\} E + \\ + Q_A Q_B - 4\beta^2 \cos^2 \frac{\xi}{2} = 0. \end{aligned} \quad (3.2)$$

It can be easily shown that in the case $S < 1/2$, which occurs only, this equation has no double roots. So the conclusion concerning two separate bands remains valid here too. The qualitative features of fig. 1 remain valid also; the energy gap will be exactly $Q_A - Q_B$ in this case too.

The width of the bands will, however, not be the same in the two bands, the upper band width being larger than the lower one by

$$\Delta = \frac{4S^2}{1 - 4S^2} \left(Q_A + Q_B - \frac{2\beta}{S} \right).$$

This expression can be negative too if the expression in the bracket is negative, i. e. in this case the lower band will be wider.

The form of the density of states curve will be modified too. (See fig. 4.)

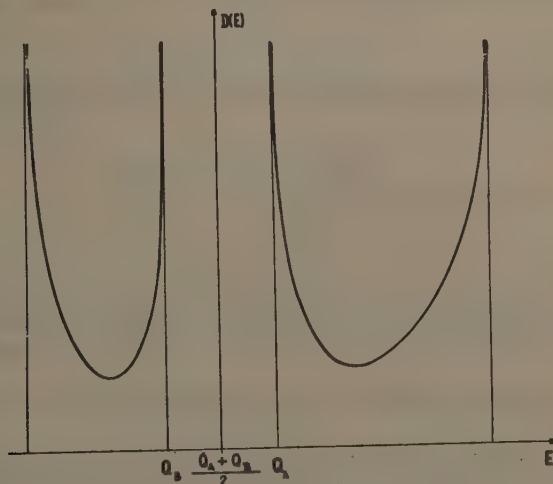


Fig. 4. Density of states in an $A-B$ type alloy, if $S \neq 0$.

The expression for the density is now

$$D = \left| \frac{d\xi}{dE} \right| = \frac{\left| Q_A + Q_B - 8\beta S \cos^2 \frac{\xi}{2} - 2 \left(1 - 4S^2 \cos^2 \frac{\xi}{2} \right) E \right|}{2 (SE - \beta)^2 \sin \xi}, \quad (3.3)$$

which can be expressed either as a function of ξ , or as one of E by means of (3.2).

The average energy per electron can similarly be calculated on the same basis as in section 2. Taking into account (3.2), (2.22) gives now as a result of a straightforward calculation :

$$\begin{aligned} \bar{E} = & \frac{\beta}{S} - \frac{|Q_A - Q_B|}{\pi} \sqrt{1 - k^2} K(k) - \frac{Q_A + Q_B - \frac{2\beta}{S}}{\pi \sqrt{1 - 4S^2}} \times \\ & [F(\arccos 2S, \sqrt{1 - k^2}) E(k) E(\arccos 2S, \sqrt{1 - k^2}) K(k) - \\ & - F(\arccos 2S, \sqrt{1 - k^2}) E(k)], \end{aligned} \quad (3.4)$$

where $K(k)$ is the complete elliptic normal integral of the first kind with argument k , and F and E with two arguments are the incomplete elliptic normal integrals of the first and second kind respectively [2]. k is here defined by

$$k = \frac{4 \sqrt{(SQ_A - \beta)(SQ_B - \beta)}}{\sqrt{(Q_A - Q_B)^2 + 16(SQ_A - \beta)(SQ_B - \beta)}}. \quad (3.5)$$

4. Alloys of $A - A - B$ type

In an alloy of the type $A - A - B$ we have

$$\nu_1 = \nu = 2 \quad \text{and} \quad \mu_1 = \mu = 1.$$

Now — in contrast to the previous sections — we must distinguish between the cases where either A or B is the atom with a higher ionization energy.

We follow the arguments without specification of the two cases as long as possible.

Our notation in this case will again be somewhat different from that in (2.1), namely we define in the case $S = 0$

$$x = \frac{Q_B - E}{\beta_A}, \quad y = \frac{Q_B - E}{\beta_A}, \quad \text{and} \quad \beta = \frac{\beta_{AB}}{\beta_A}, \quad (4.1)$$

where β_A is the exchange integral between two neighbouring A atoms and β_{AB} is that between an A atom and an adjacent B atom.

The secular determinant equation is now after dividing each row by β_A and introducing the notations (4.1) :

$$\Delta_{3n} = \begin{vmatrix} (1) & x & 1 & & & & \\ (2) & 1 & x & \beta & & & \\ (3) & & \beta & y & \beta & & \\ (4) & & & \beta & x & 1 & \\ (5) & & & & 1 & x & \beta \\ (6) & & & & & \beta & y \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ (3n-2) & & & & & & x & 1 \\ (3n-1) & & & & & & 1 & x & \beta \\ (3n) & & & & & & & \beta & y \end{vmatrix} = 0. \quad (4.2)$$

If we define now an operator Ω , which reduces the index of Δ by 3, i. e.

$$\Omega \Delta_k = \Delta_{k-3}, \quad (4.3)$$

we have the following recursion formulae by expanding the determinant in (4.2) :

$$\left. \begin{aligned} \Delta_{3n} &= x \Delta_{3n-1} - \Delta_{3n-2}, \\ \Delta_{3n-1} &= x \Delta_{3n-2} - \beta^2 \Omega \Delta_{3n}, \\ \Delta_{3n-2} &= y \Omega \Delta_{3n} - \beta^2 \Omega \Delta_{3n-1}. \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

Considering (4.4) as a linear homogeneous system of equations in Δ_{3n} , Δ_{3n-1} and Δ_{3n-2} , we conclude, that the existence of a non-trivial solution demands

$$\begin{vmatrix} 1 & -x & 1 \\ \beta^2 \Omega & 1 & -x \\ y \Omega & \beta^2 \Omega & 1 \end{vmatrix} = 0, \quad (4.5)$$

i. e. again a quadratic equation for Ω :

$$1 + [y(1-x^2) + 2\beta^2 x] \Omega + \beta^4 \Omega^2 = 0. \quad (4.6)$$

The result of a similar method of generating functions as in section 2 is, that Δ_{3n} is the coefficient of t^n in the expansion of the generating function $f(t)$ in power series, where

$$f(t) = \frac{1 + \beta^2 x t}{1 + [y(1-x^2) + 2\beta^2 x] t + \beta^4 t^2}. \quad (4.7)$$

Now equation (4.2) can be written

$$\frac{x}{\beta^2} \frac{t_2^n - t_1^n}{t_2 - t_1} + \frac{t_2^{n+1} - t_1^{n+1}}{t_2 - t_1} = 0, \quad (4.8)$$

where t_1 and t_2 are the roots of equation (4.6). Taking into account that by (4.6)

$$t_1 t_2 = \frac{1}{\beta^4}, \quad (4.9)$$

we introduce the variable ξ according to

$$t_1 = \frac{1}{\beta^2} e^{-i\xi}, \quad t_2 = \frac{1}{\beta^2} e^{i\xi}. \quad (4.10)$$

With this new variable we can re-write equation (4.8) in the form

$$x = - \frac{\sin(n+1)\xi}{\sin n\xi}, \quad (4.11)$$

further from equation (4.6) we have

$$y(1-x^2) + 2\beta^2 x = -\beta^4(t_1 + t_2) = -2\beta^2 \cos \xi, \quad (4.12)$$

and using now (4.11),

$$y = -\beta^2 \frac{\sin 2n\xi}{\sin(2n+1)\xi}. \quad (4.13)$$

Subtracting (4.13) from (4.11) we find an equation for ξ , which does not contain E (see the definitions (4.1)), so that we can determine the values of ξ . If we consider the case, where $n \rightarrow \infty$, i. e. an infinite crystal of the $A-A-B$ structure, these ξ values cover continuously the $(0, \pi)$ interval. In this case the roots for E give three bands, which are given by (4.12) and (4.1) in the form:

$$E^3 - (2Q_A + Q_B) E^2 + (Q_A^2 + 2Q_A Q_B - \beta_A^2 - 2\beta_{AB}^2) E - Q_B(Q_A^2 - \beta_A^2) + 2Q_A \beta_{AB}^2 + 2\beta_{AB}^2 \beta_A \cos \xi = 0, \quad (0 \leq \xi \leq \pi). \quad (4.14)$$

This equation has (in general) no double roots, thus we have three separate bands for which the band-edges are placed at the six values

$$E = Q_A \pm \beta_A, \quad (\xi = \{0, \pi\}),$$

$$E = \frac{Q_A + Q_B - \beta_A \pm \sqrt{(Q_A - Q_B - \beta_A)^2 + 8\beta_{AB}^2}}{2}, \quad (\xi = 0), \quad (4.15)$$

$$E = \frac{Q_A + Q_B + \beta_A \pm \sqrt{(Q_A - Q_B + \beta_A)^2 + 8\beta_{AB}^2}}{2}, \quad (\xi = \pi).$$

An easy investigation shows that $\frac{dE}{d\xi}$ is negative in the lowest and highest band and that it is positive in the third band. (See fig. 5.)

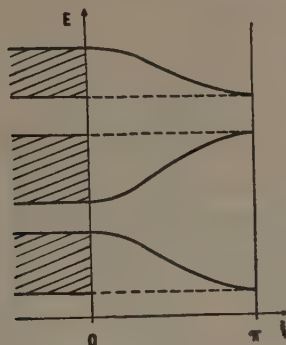


Fig. 5. $E-\xi$ diagram and the band-structure for an $A-A-B$ type alloy.

The energy gaps are easily obtained as

$$\Delta E = \frac{|Q_A - Q_B + 3\beta_A + \sqrt{(Q_A - Q_B - \beta_A)^2 + 8\beta_{AB}^2}|}{2}$$

between the two lower bands and

$$\Delta E = \frac{|Q_A - Q_B - 3\beta_A - \sqrt{(Q_A - Q_B + \beta_A)^2 + 8\beta_{AB}^2}|}{2}$$

between the two upper bands. These energy gaps can vanish only in the case

$$\frac{\beta_A^2 - \beta_{AB}^2}{-\beta_A} = Q_A - Q_B \quad (4.16)$$

for the lower gap and in the case

$$\frac{\beta_A^2 - \beta_{AB}^2}{-\beta_A} = Q_B - Q_A \quad (4.17)$$

for the higher gap.

The left-hand side of (4.16) and (4.17) is always positive, and thus at most one of the gaps can vanish; the lower gap can vanish if the A atom has less ionization energy than B , and the upper gap in the opposite case.

The energy level density is

$$D = \left| \frac{d\xi}{dE} \right| = \left| \frac{3E^2 - 2(2Q_A + Q_B)E + 2Q_A Q_B - \beta_A^2 - 2\beta_{AB}^2}{2\beta_{AB}^2 \beta_A \sin \xi} \right|. \quad (4.18)$$

(See fig. 6.)

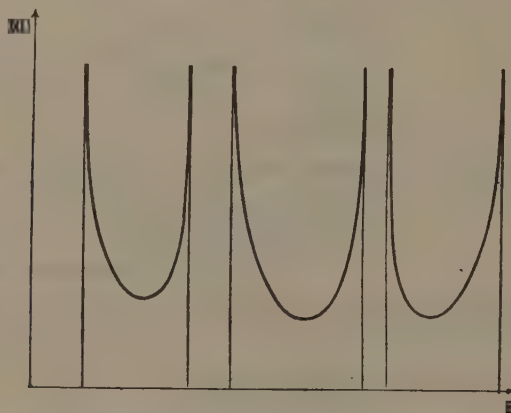


Fig. 6. Density of states in an $A-A-B$ type alloy.

The average energy pro electron is now at absolute zero temperature

$$\bar{E} = \frac{2}{3\pi} \int_0^\pi E_1 d\xi + \frac{2}{3\pi} \int_0^{\pi/2} E_2 d\xi, \quad (4.19)$$

where E_1 is the lowest, E_2 the next higher root of equation (4.14).

These integrals are hyperelliptic integrals, which it is easiest to evaluate by numerical integration for given values of the constants. The first integral in (4.19) is to be taken between the limits of the lowest band and it is a complete hyperelliptic integral, whereas the second one must be taken between the lower limit of the second band and the middle root of the equation

$$E^3 - (2Q_A + Q_B)E^2 + (2Q_A Q_B - \beta_A^2 - 2\beta_{AB}^2)E - Q_B(Q_A^2 - \beta_A^2) + 2Q_A \beta_{AB}^2 = 0,$$

which gives an incomplete hyperelliptic integral.

The binding energies can be evaluated in a similar manner as in section 2.

For $S \neq 0$ we consider S_A and S_{AB} , the overlap integrals between two adjacent A atoms and between an A atom and an adjacent B atom respectively. So we introduce instead of (4.1)

$$\left. \begin{aligned} x &= \frac{Q_A - E}{\beta_A - S_A E}, & y &= \frac{Q_B - E}{\beta_A - S_A E} \\ \text{and} \\ \beta &= \frac{\beta_{AB} - S_{AB} E}{\beta_A - S_A E}. \end{aligned} \right\} \quad (4.20)$$

The eigenvalues are given in this case also by equation (4.12). Now this equation gives a cubic equation for E again for all ξ . The roots of this equation for $\xi = 0$ and $\xi = \pi$ are easily obtained considering that for these cases (4.12) has the roots $x = -1$ and $x = 1$ respectively. These roots give

$$E = \frac{Q_A \pm \beta_A}{1 \pm S_A}, \quad (4.21)$$

where the upper sign relates to $\xi = 0$ and the lower one to $\xi = \pi$.

For $\xi = 0$ (4.12) gives the other roots by the equation

$$y(1 - x) = -2\beta^2, \quad (4.22)$$

and for $\xi = \pi$ by the equation

$$y(1 + x) = 2\beta^2. \quad (4.23)$$

(4.22) and (4.23) both have in general two real roots. In this case the energy spectrum again consists of three separate bands.

In the case of one of the equations (for $\xi = 0$, or for $\xi = \pi$) having a double root and the other having two real roots, there are only two bands and if this occurs twice, there is only one band. However, a discussion of these features is less complicated in actual cases, i. e. with numerical values of the quantities occurring. The calculation of the densities and the average energy pro electron is more difficult in this case, and it is worth while to calculate only for numerical cases.

However, we can conclude that such an alloy is always conducting, because the second band is filled only up to its middle.

5. Alloys of $A - A - A - B$ type

In the case of an $A - A - A - B$ type alloy we have $\nu_1 = 3$, $\mu_1 = 1$, $p = 1$. With the same notation as in section 4 we find in a similar way, that for $n \rightarrow \infty$ the eigenvalues are the solutions of the equation

$$2\beta^2(x^2 - 1) - xy(x^2 - 2) = -2\beta^2 \cos \xi, \quad (5.1)$$

where $0 \leq \xi \leq \pi$.

For $\xi = \pi$ this equation reduces to

$$(x^2 - 2)(2\beta^2 - xy) = 0, \quad (5.2)$$

which gives (if we neglect the overlap)

$$\left. \begin{aligned} E &= Q_A \pm \sqrt{2} \beta_A, \\ E &= \frac{Q_A + Q_B}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{Q_A - Q_B}{2}\right)^2 + 2\beta_{AB}^2}. \end{aligned} \right\} \quad (5.3)$$

In the case $\xi = 0$ we have similarly

$$x(2\beta^2 x - yx^2 + 2y) = 0, \quad (5.4)$$

the solutions of which are

$$E = Q_A \quad (5.5)$$

and the solutions of the cubic equation

$$\begin{aligned} E^3 - (2Q_A + Q_B)E^2 + (Q_A^2 + 2Q_A Q_B - 2\beta_{AB}^2 - 2\beta_A^2)E - \\ - Q_B Q_A^2 + 2Q_A \beta_{AB}^2 + 2Q_B \beta_A^2 = 0. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Further investigation shows that (5.2) and (5.4) have no double roots, thus there are always four separate bands. At absolute zero the two lower bands are filled up and the two higher bands are empty.

6. Alloys of $A-A-B-B$ type The general case

Now let us consider the general case. However, we here do not give a general treatment but only a simple example, which is not an exceptional case (see section 1) and which shows all the features of the general treatment. This example is the $A-A-B-B$ type alloy.

Here — and in the general case — we use the notations (if all overlap integrals are neglected)

$$x = \frac{Q_A - E}{\beta_A}, \quad y = \frac{Q_B - E}{\beta_B}, \quad (6.1)$$

further

$$\beta = \frac{\beta_{AB}}{\beta_A} \quad \text{and} \quad \beta' = \frac{\beta_{AB}}{\beta_B}, \quad (6.2)$$

$$\begin{vmatrix} 1 & -x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -x & \beta\beta' \\ \Omega & 0 & 1 & -y \\ -y\Omega & \beta\beta'\Omega & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0. \quad (6.6)$$

This is a quadratic equation in Ω . (The same is true for the general case.) Now the method of generating functions can be applied here and in the general case too. So we have for $n \rightarrow \infty$ the equation for the energy values:

$$(y^2 - 1)(1 - x^2) + \beta\beta'(2xy - \beta\beta') = -2\beta\beta' \cos \xi, \quad (6.7)$$

where $0 \leq \xi \leq \pi$.

It is easily seen by substitution that for $\xi = 0$

$$-xy \pm (y + x) = 1 - \beta\beta' \quad (6.8)$$

is a solution, further this gives all four solutions of (6.7) for $\xi = 0$. Similarly for $\xi = \pi$

$$xy \pm (x + y) = 1 + \beta\beta' \quad (6.9)$$

gives all four solutions.

(6.8) and (6.9) both have real roots so that the energy spectrum generally consists of four separate bands. The limits of the bands are thus the solutions of the equations

$$\begin{matrix} + \\ (1) \end{matrix} (Q_A - E) \begin{matrix} - \\ (2) \end{matrix} (Q_B - E) \begin{matrix} + \\ (2) \end{matrix} [Q_A \beta_B \begin{matrix} - \\ (1) \end{matrix} Q_B \beta_A - (\beta_B \begin{matrix} - \\ (1) \end{matrix} \beta_A) E] = \beta_A \beta_B \begin{matrix} + \\ (1) \end{matrix} \beta_{AB}^2, \quad (6.10)$$

where the double signs denoted by (1) and (2) vary independently.

The solutions of these equations are

$$E = \frac{Q_A + Q_B}{2} \begin{matrix} - \\ (2) \end{matrix} \frac{\beta_A \begin{matrix} - \\ (1) \end{matrix} \beta_B}{2} \begin{matrix} + \\ (3) \end{matrix} \frac{\sqrt{[Q_A - Q_B \begin{matrix} - \\ (2) \end{matrix} (\beta_A \begin{matrix} + \\ (1) \end{matrix} \beta_B)]^2 + 4_{AB}^2}}{2}, \quad (6.11)$$

where the double sign denoted by (3) varies independently of both (1) and (2). Thus this gives eight separate roots. These roots are, however, not symmetrically located with respect to $\frac{Q_A + Q_B}{2}$ as they are in an $A - B$ type alloy (see fig. 7).

According to Pauli's principle the two lower bands will be filled up and the two upper ones will be empty at absolute zero. So we can evaluate the average energy pro electron:

$$\bar{E} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi E_{(1)} d\xi + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi E_{(2)} d\xi, \quad (6.12)$$

where $E_{(1)}$ in the first integral denotes the lowest root of (6.7) for E and $E_{(2)}$ in the second integral denotes its next higher root.

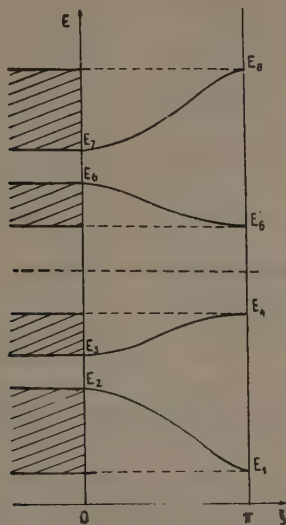


Fig. 7. E — ξ diagram and the band-structure for an $A-A-B-B$ type alloy. ($Q_A < Q_B$).

(6.12) can be transformed into the form :

$$E = \frac{E_1 + E_4}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_{E_1}^{E_2} \arccos \frac{(y^2 - 1)(1 - x^2) + \beta\beta'(2xy - \beta\beta')}{-2\beta\beta'} dE - \\ - \frac{1}{2\pi} \int_{E_3}^{E_4} \arccos \frac{(y^2 - 1)(1 - x^2) + \beta\beta'(2xy - \beta\beta')}{-2\beta\beta'} dE, \quad (6.13)$$

where E_1 is the lowest and E_4 the next lowest root of (6.9) and E_2 is the lowest and E_3 the next lowest root of (6.8), the \arccos being taken in the interval $(0, \pi)$ — The integrals in (6.13) can be evaluated numerically in actual cases ; they are hyperelliptic integrals.

If we do not neglect the overlap integrals, equations (6.8) and (6.9) hold now with the values

$$x = \frac{Q_A - E_A}{\beta_A - S_A E}, \quad y = \frac{Q_B - E_B}{\beta_B - S_B E}, \quad (6.14)$$

$$\beta = \frac{\beta_{AB} - S_{AB} E}{\beta_A - S_A E} \quad \text{and} \quad \beta' = \frac{\beta_{AB} - S_{AB} E}{\beta_B - S_B E},$$

instead of (6.1) and (6.2).

Equations (6.10) are now changed to

$$\begin{aligned} & \binom{+}{(1)} (Q_A - E) \binom{-}{(2)} (Q_B - E) \binom{+}{(2)} [(Q_A - E) (\beta_B - S_B E) \binom{-}{(1)} (Q_B - E) (\beta_A - S_A E)] = \\ & = (\beta_A - S_A E) (\beta_B - S_B E) \binom{+}{(1)} (\beta_{AB} - S_{AB} E)^2. \end{aligned} \quad (6.15)$$

The position of the bands is in this case qualitatively the same as in the case of the neglected overlap integrals.

The results of the calculations for the binding energy show that if $\beta_{AB} < \beta_A, \beta_B$, the $A-B-A-B$ type is always more stable than the $A-A-B-B$ type; if $\beta_{AB} > \beta_A, \beta_B$, the $A-A-B-B$ type is always more stable than the $A-B-A-B$ type. In other intermediate cases the stability of the two types cannot be determined so simply.

This last feature of the relative stability of an $A-B-A-B$ and an $A-A-B-B$ type alloy can be generalized for more complicated cases, and it can be made the basis for a statistical treatment of some structure-sensitive properties of ordered and disordered alloys.

We have seen in this section, how to attack the general case of a binary alloy. A quadratic equation arises for Ω in this case. It is easy to show, that this quadratic equation is always of the form

$$1 + M\Omega + (\beta\beta')^{2p} \Omega^2 = 0, \quad (6.16)$$

with p defined in section 1. Here M can be expressed by x, y, β and β' , i. e. M is a function of the Coulomb, exchange, and overlap integrals and the energy parameter E . Using now the method of generating functions and considering an infinite crystal (i. e. $n \rightarrow \infty$), we get the eigenvalues of E from the equation

$$M = -2(\beta\beta')^p \cos \xi, \quad (6.17)$$

where $0 \leq \xi \leq \pi$.

Equation (6.17) is of the grade $\nu + \mu$ and it has in general $\nu + \mu$ separate roots. This means that $\nu + \mu$ separate bands exist in general. Only in the case of multiple roots of (6.17) can some of the bands collide. (See fig. 8.)

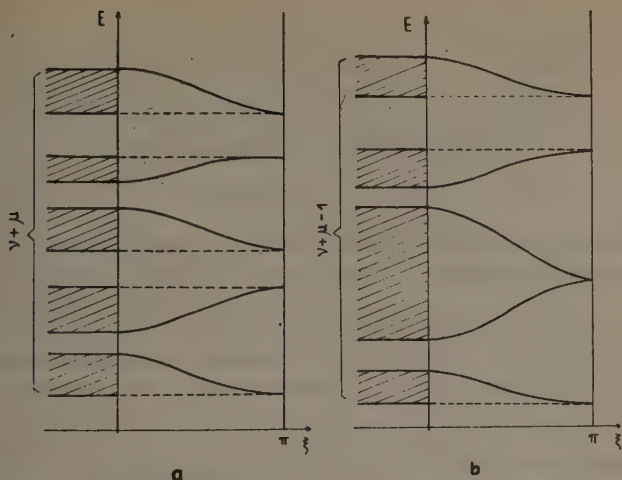


Fig. 8. $E-\xi$ diagram and the band-structure a) in the case of no multiple roots; b) in the case of a multiple root.

The methods followed in this paper can be easily generalized for linear ternary and higher systems, if we neglect the effect of non-neighbouring atoms. This, further the extreme cases, in which some of the components are present to a very small extent (impurities), will be discussed in a following paper.

I am indebted to Zs. Náray for drawing the figures.

REFERENCES

1. T. A. Hoffmann and A. Kónya, *Acta Phys. Hung.*, **1**, 5 (1951); *Journ. of Chem. Phys.*, **16**, 1172 (1948).
2. Jahnke—Emde, *Tables of Higher Functions*, 4th ed., Leipzig (1948), p. 74.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ТЕОРИИ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

II. Линейная цепь различных атомов

Т. А. Гоффманн

(Резюме)

В настоящей статье рассматривается линейная цепь двух различных сортов атомов. Бинарные системы обсуждаются в общем без принятия во внимание числа всех атомов.

Заданы формулы для вычислений связанных с такими упорядоченными линейными сплавами бинарного типа. Велись подробные исследования относительно типов $A-B-A-B$, $A-A-B$, $A-A-B-B$ и $A-A-A-B$ пренебрежением интегралами покрытия, как и без этого пренебрежения.

LETTERS TO THE EDITOR

NOTES ON THE RISE AND DECAY OF WILLEMITE LUMINESCENCE

(Received 15. XII. 1950.)

In a previous paper [1] author reported on the investigations of the phosphorescence of willemite with cathode-ray excitation. This paper contains some supplementary data.

The investigations have dealt with the phosphorescence of an artificial willemite of 0,2% manganese content. Excitation was made by pulses of varying duration between 1 and 280 microseconds, separated in each case by an interval of 20 milliseconds. Measurements were also carried out with excitations of rectangular wave form, the pulse length being equal to that of the pause.

Fig. 1. shows the experimental arrangement. The pulses produced by a pulse generator (Orion SP 61221) or by a square wave generator (Orion SP 60881) were applied to the deflecting plate P of a cathode-ray tube.

The fluorescent screen S was covered with black paper, except for a 2×2 square millimeter spot L, on which the electrons impinged during the pulse.

A multiplier phototube was placed before the spot with a load resistance R of 70 000 ohm. A Weiss type multiplier phototube and, in some measurements, a 931 A tube were used.

The signals on the resistance were amplified by a two step wide band amplifier 25 c — 5 Mc (Orion SP 21 011) and brought to the plates of a cathode ray oscilloscope, the pattern of which was photographed.

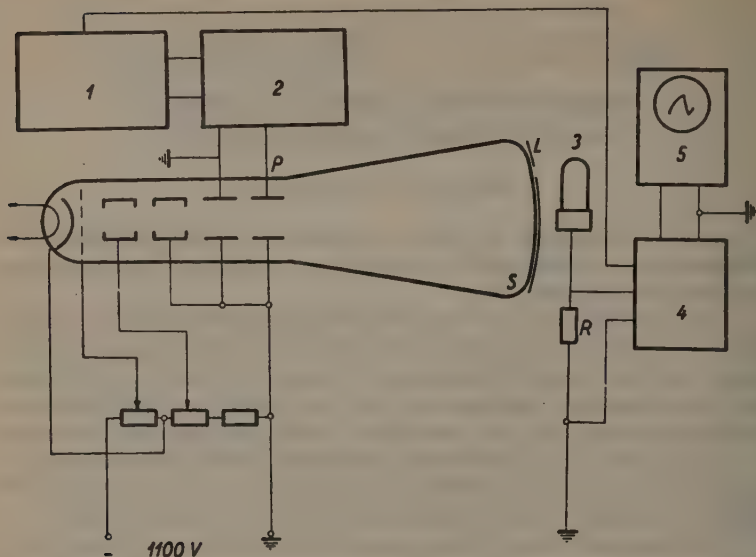
The mathematical analysis of the experimental curves indicates that the total decay curve may be described by the superposition of three exponentials of the form

$$I = I_0 e^{-at}.$$

The decay constants were $a_1 = 200/\text{sec.}$, $a_2 = 1800/\text{sec.}$, $a_3 = 72\,000/\text{sec.}$

The decay constants a are independent of the excitation duration and intensity, but the amplitudes of the single components are determined by the duration of excitation.

The decay constants and amplitudes are functions of the activator (manganese) content. The fast component of the decay curve is prominent in samples with light amounts of manganese, below about 0,3%. It could be detected



1.

Fig. 1. Experimental arrangement. Notations:

- | | |
|--|--------------------------|
| 1. Audiofrequency generator. | 3. Multiplier phototube. |
| 2. Pulse generator or square wave generator. | 4. Amplifier. |
| 5. C. R. oscilloscope. | |

in samples with greater manganese content too, but only with a very small amplitude.

The amplitudes and the decay rates of the slower components are also varying with the manganese concentration. Detailed data will be published in a forthcoming paper.

In a recent paper Nagy [2] offered an explanation for the occurrence of the three components. He has shown that these components are related to the emission bands of willemite in luminescence found by Szigeti and Nagy [3], [4], [5].

Gy. Gergely

Research Laboratory for Telecommunication,
Budapest.

REFERENCES

1. Gy. Gergely, J. Opt. Soc. Am., **40**, 457 (1950).
2. E. Nagy, J. Opt. Soc. Am., **40**, 407 (1950).
3. G. Szigeti and E. Nagy, Műegyetemi közlemények, 1948.
4. E. Nagy, J. Opt. Soc. Am., **39**, 42 (1949).
5. E. Nagy and Gy. Gergely, Acta Phys. Hung., **1**, 127 (1951).

ÜBERGANGSSCHICHT ZWISCHEN WACHSENDEN KRISTALLEN UND IHRER LÖSUNG

von

Z. GYULAI und S. BIELECK †

INSTITUT FÜR EXPERIMENTAL-PHYSIK DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(EINGEGANGEN : 3. IV. 1951)

An der Berührungsgrenze zwischen Kristall und Lösung befindet sich eine Übergangsschicht, in der die Ionen und die Wassermoleküle in gewissermassen zum Teil geordneter Weise die Fortsetzung des Kristalles bilden. Diese zum Teil geordnete Schicht wächst dann zeitweise in der von Kossel beschriebenen Weise an den Kristall an. Diese Art des Wachstums der Kristalle gibt die Erklärung für die an den Kristallen beobachtete Schichtung.

1. *Kossel* hat für das Wachstum der Kristalle eine atomistische Betrachtung aufgestellt laut welcher der Kristall pulsierend wächst [1]. Im Falle von Ionenkristallen bilden die Kristallspitzen und -kanten die Ausgangspunkte für das pulsierende Wachstum. Dieses pulsierende oder abschnittsweise Wachsen kann experimentell beobachtet werden [2]. Die Dicke jener Schicht, die auf obige Weise beobachtet werden kann, liegt jedoch bei *NaCl* in einer Grössenordnung von ca. 0,001 mm, während das theoretische Verfahren nach *Kossel* auf einzelne Ionenschichten Bezug nimmt. Mit Rücksicht auf die Gesetze der Diffusion ist hier aber folgende Überlegung einzuschalten: Wenn die Konzentration in der Nähe der Kristallflächen genau so gross ist, wie in den anderen Teilen der Lösung, so erscheint es unverständlich, warum so viele Ionen auf einmal aus der Lösung ausgeschieden werden. Dies würde nämlich in der Nähe der Kristallflächen einen Mangel an Ionen zur Folge haben. Wird hingegen angenommen, dass die Konzentration in der Nähe der Kristallflächen grösser ist, so ist dies in Anbetracht der Diffusion nicht verständlich, denn die Ionen werden nicht von Stellen mit geringerer Konzentration dorthin diffundieren, wo die Konzentration grösser ist. Einerseits ist es also notwendig, dass in der Nähe der Kristallflächen eine grössere Menge Ionen vorhanden sei, andererseits geht es nicht an, mit dem Gesetz der Diffusion in Widerspruch zu geraten.

2. Es muss also eine Erklärung gefunden werden, wieso in nächster Nähe der Kristallflächen eine grössere Ionenkonzentration entstehen kann. Dies kann nur auf eine neu auftretende Wirkung zurückgeführt werden. (Dieses Problem wurde vom Verfasser zum erstenmal im Jahre 1946 theoretisch beleuchtet [3].) Die dabei angestellte theoretische Überlegung war folgende: Die Ionen des Kristalles üben auch nach aussen, auf die in der Lösung befindlichen Ionen eine Anziehung aus. Da es sich um eine übersättigte Lösung handelt, werden

auch offensichtlich Ionen vorhanden sein, deren Hydrathülle nicht mehr vollkommen ist. Es ist demnach zu erwarten, dass sich einzelne Ionen zusammen mit ihrer Hydrathülle an die Oberfläche des Kristalls anlagern werden. Es ist auch in Betracht zu ziehen, dass die Wassermoleküle Dipole sind und dass sie deshalb in der Nähe der Kristallflächen der Anziehungskraft der Ionen unterliegen, d. h., dass sich einzelne H_2O Moleküle gleichfalls an die Oberfläche des Kristalls anlagern werden. Ob das Wassermolekül mit seinen Polen an ein Ionenpaar anhaftet oder ob es sich gewissermassen auf einem Ion festsetzt, kann nicht festgestellt werden, dabei spielen auch die Grössenverhältnisse der Ionen und Moleküle mit, doch ist es auf Grund dieser Tatsachen höchst wahrscheinlich, dass an die äussere Ionenschicht des Kristalls zum Teil Ionen und zum Teil Wassermoleküle in einer gewissen Ordnung anhaften werden. Diese am Kristall haftende

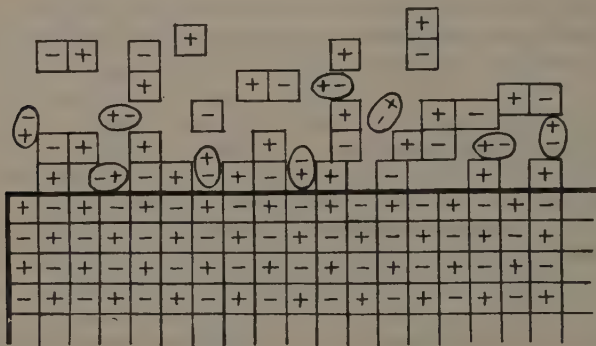


Abb. 1. Schematische Zeichnung der Übergangsschicht

Schicht bildet in gewisser Beziehung die Fortsetzung des Gitters (Abb. 1.); es handelt sich also um eine geordnete, aber weniger vollkommene Ordnung als der Kristall selbst. Ähnlicherweise wird sich auf diese zum Teil geordnete Schicht eine andere Schicht setzen, die ähnlich wie die vorige aus Ionen und Wassermolekülen besteht; in dieser zweiten Schicht wird die Ordnung ihrer Bestandteile in einem geringeren Ausmass vorhanden sein als in der ersten. So können übereinander mehrere solche Schichten Platz finden, wobei die Konzentration der Ionen in der Grenzschicht grösser sein wird als in der Lösung selbst. So wird dann die Kristalloberfläche selbst mit ihrer Ionenstruktur, die über ein gut definiertes elektrisches Kraftfeld verfügt, jenes Agens bilden, welches die Ionen — im Vergleich zur Lösung — konzentrieren wird. Es kann also kurz gesagt werden, dass an der Oberfläche des Kristalls — infolge von Ionenkräften — sich eine teilweise geordnete Schicht ausbildet, in der die Ionenkonzentration grösser ist, als in der Lösung. In dieser Schicht

wird die Brownsche Bewegung bereits kleiner sein als in der Lösung. Die Struktur dieser Übergangsschicht wird gegen die Lösung allmählich schlechter werden.

Der Vorgang des Kristalls-Wachstums kann jetzt folgendermassen so aufgefasst werden: Das Gleichgewicht (Quasigleichgewicht) in einem Punkt der Übergangsschicht wird gestört, und daraufhin lagern sich die halbwegsgeordneten Ionen der Übergangsschicht dem Kristall an. Diese Gleichgewichtstörung in der Übergangsschicht geschieht am ehesten an einer Spitze oder Kante aus den nach Kossel bekannten energetischen Gründen. Durch dieses Sichanlagern entsteht aber jetzt nicht eine einzige Ionenschicht, sondern eine Schicht von der Dicke von mehreren Ionendurchmessern, je nachdem, wie viele Ionen gerade in der Übergangsschicht angehäuft sind. Bei diesem Prozess erfolgt nicht nur das, dass die Ionen an den Kristall anwachsen, sondern auch das, dass die überflüssigen Wassermoleküle aus einem gewissen Raum verdrängt werden. Diese verdrängten Wassermoleküle können dort jedoch keine zu grosse Verdünnung hervorrufen, sondern sie vermischen sich mit dem entfernteren Teil der Übergangsschicht und bewirken höchstens, dass dort eine Konzentration entsteht, wie sie in den entfernteren Teilen der Lösung herrscht. Dies scheint qualitativ wahrscheinlich zu sein, denn die Konzentration der Lösung war von Anfang an gesättigt, und es entstand in ihr an der Kristalloberfläche eine grössere Ionenkonzentration. Die Ionenmenge, die diese grössere Ionenkonzentration hervorruft, ist es eben, die an den Kristall anwächst. Mit dieser Überlegung steht vielleicht nicht im Gegensatz, dass — im gegebenen Falle —, in einem einzigen Akt, zum Kristall nur eine Ionenschicht anwächst. In diesem Falle wird das Wachstum des Kristalls sehr langsam vor sich gehen. Die Bedingung dafür ist, dass das Verdampfen der Lösung nur sehr langsam erfolgt, was ja in der Praxis auch meist der Fall ist.

Wird dieses Bild nun weiter analysiert, so folgt daraus, — da auf einmal verhältnismässig rasch mehrere Ionenschichten entstehen — dass in dieser Schicht einzelne Wassermoleküle eingeschlossen bleiben können und dass an einzelnen Stellen fehlerhafte Struktur auch auftreten kann. Man kann also sagen, dass es infolge des geradezu lawinenartigen Wachstums vorkommen kann, dass einige regelmässig gewachsene Stellen eine weniger regelmässig gewachsene sozusagen einschliessen. Auf diese Weise erfolgt auch die Einschliessung von Verunreinigungen in Kristallen. Die obige Überlegung steht auch im Einklang mit der allgemeinen Erfahrung, dass sich Kristalle von guter, vollkommener Struktur nur bei langsamen Wachstum ausbilden. Diese Regel hat für jegliche Form des Wachstums von Kristallen Geltung, also für das Wachstum aus Lösungen, Dämpfen oder Schmelzen.

3. Es entsteht nun die Frage, was für experimentelle Beweise für das tatsächliche Vorhandensein der Übergangsschicht erbracht werden können. Die vom Verfasser durchgeführten Versuche, bei denen die Frage durch Mes-

sung der inneren Reibung geklärt werden sollte, ergaben keine befriedigenden Resultate. In der letzten Zeit gelang es jedoch mehrere Beobachtungen zu machen, die als positive Beweise aufgefasst werden können. Eine dieser Beobachtungen ist die folgende: Wird in einem flachen Gefäß *NaCl* Lösung



Abb. 2. Die am Boden des Gefäßes gewachsenen *NaCl* Kristalle mit Querstreifen (3,5-fache Vergrößerung)

verdampft, so erscheinen auf dem Boden des Gefäßes kleine Kristalle. Diese Kristalle zeigen mit der Zeit fast ausnahmslos eine gewisse Querstreifung (Abb. 2.). Der Querschnitt durch einen solchen Kristall wird auf Abb. 3 gezeigt. Die Querstreifung wird zum Teil durch Okklusion von Luft verursacht. Der Kris-

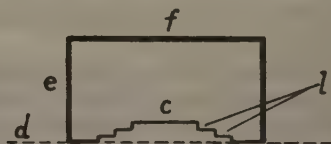
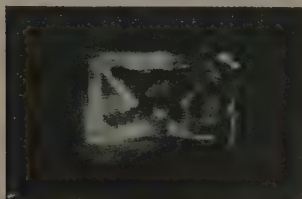


Abb. 3/a Querschnitt durch einen Kristall. Unten stufenförmige Erhöhung. Auch Spuren von Querstreifen sind sichtbar (16 fache Vergrößerung)

Abb. 3/b Schema des Querschnittes

tall von unten betrachtet nimmt, nachdem er zu wachsen begonnen hat, in kurzer Zeit eine stufenförmige Struktur an (Abb. 3.). Die Entstehung dieser stufenförmigen Struktur kann nur durch die an der Oberfläche des Kristalls befindliche Übergangsschicht erklärt werden. Der Kristall lag nämlich am Anfang mit seiner Fläche *c* auf der Glasplatte *d*. Später hob er sich in die Höhe. In diesem hochgehobenen Zustand befindet sich unter der Fläche *c* die Lösung. Hier geht keine Verdampfung vor sich, die Stufen *l* des Kristalls können sich

also nicht aus diesem Stoffe gebildet haben. Die Stufen *l* können also nur auf die Weise entstanden sein, dass der Stoff von den Seitenflächen *e* des Kristalls sozusagen unter den Kristall geflossen war. Das Ganze kann man sich also in der Weise vorstellen, dass sich an den Flächen *e* des Kristalls und natürlich auch unter der Deckfläche *f* die Übergangsschicht ausgebildet hat. Sobald der Vorgang des Wachsens beginnt, fängt der Stoff der Übergangsschicht an den Flächen von den Spitzen bzw. Kanten her zu zerfließen und dringt über die unteren Kanten der Fläche *e* in den Raum unter den Kristall ein. Wenn der Kristall bereits genügend gross geworden ist, so reicht der zur Verfügung stehende Stoff nicht mehr aus, um die untere Fläche völlig auszufüllen. Dann ist er nur noch imstande, bis zu einer gewissen Entfernung von der äusseren Kante einzudringen. So ist es denn selbstverständlich, dass die Stufen im unteren Teil nach

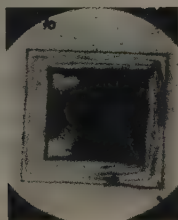


Abb. 4/a Stufen am unteren Teil eines *NaCl* Kristalls (15-fache Vergrösserung)

Abb. 4/b Stufen am unteren Teil eines Alaunkristalls (15-fache Vergrösserung)

aussen zu verlaufen, weil der Kristall auch in die Breite ununterbrochen im Wachsen ist. Diese Erscheinung ist nicht nur bei *NaCl* sondern auch bei Seignette-Salz, wo die Stufen manchmal Ausmasse von Zentimetergrösse annehmen, zu beobachten ist. Abb. 4 zeigt eine solche photographische Aufnahme. Diese Erscheinung ist höchst allgemein und kann leicht hervorgerufen werden, was darauf schliessen lässt, dass die erwähnte Übergangsschicht eine allgemeine Erscheinung ist und gut definierte Eigenschaften aufweist. Es soll hier erwähnt werden, dass der Verfasser in seiner im 1935 erschienenen Abhandlung [2] bereits die Front der die Flächen entlang vordringenden Schicht beobachtet hatte, die sich gleichermassen tastend, in einer krummen Stirnlinie vorschiebt. (Siehe auch die schematische Abbildung 2 des zitierten Aufsatzes.) Die Reste dieser Flächenschichten können an vielen natürlichen Kristallen beobachtet werden. Die Schichten wurden während ihres Wachstums auch an anderen Stoffen beobachtet, so von C. W. Bunn und H. Emmeth [4]. Die Abb. 9 in ihrer Abhandlung stellt gerade die Beobachtung des schichtenweisen Wachsens im Falle von Ammoniumsulfat dar. Dieselben Autoren publizieren auch in Abb. 3 der zitierten Arbeit mikroskopische Aufnahmen über das schichtenweise Wachstum.

Schliesslich führt C. W. Bunn den Nachweis [5], dass die Konzentration einer Lösung um einen im Wachstum befindlichen Kristall herum eine Verminderung aufweist. Er beweist dies auf optischem Wege und misst es auch durch Interferenzaufnahmen aus, aus denen hervorgeht, dass in einer Entfernung von 0,5—1 mm von der Kristalloberfläche ein noch messbarer Konzentrationsunterschied besteht. Nach Bunn ist die Erhöhung der Konzentration im Fall von NaClO_3 , wo der Kristall stark wächst, geringer als dort, wo kein Wachstum eintritt. Bunn erwartete, dass die Konzentration dort höher sein werde, wo der Kristall stark wächst. Da er gerade das Gegenteil davon feststellen musste, so fand er dies unverständlich und begann, einen neuen Wirkungsfaktor zu suchen. Nach der Meinung der Verfasser ist dieser Wirkungsfaktor eben die an den Kristallflächen befindliche Übergangsschicht, die von zum Teil geordneten Ionenkräften zusammengehalten wird. Das Anwachsen der Übergangsschicht an den Kristall ist es gerade, was die Übersättigung in der nächsten Nähe des Kristalls vermindert. Wenn das Wachstum nicht aussetzt, so erfolgt die Bildung der Übergangsschicht und ihr Anwachsen an den Kristall kurz aufeinander, und dieser Vorgang vermindert eben die Übersättigung an dieser Stelle. Die unabhängige Struktur und die Tätigkeit der Übergangsschicht geben also eine Erklärung für die Beobachtungen Bunn's.

4. Eine andere Serie der von Verfassern durchgeführten Beobachtungen bezieht sich auf die an der freien Oberfläche der Lösung wachsenden — schwebenden — Kristalle. Es ist wahrscheinlich, dass die zuoberst auf der Lösung schwim-

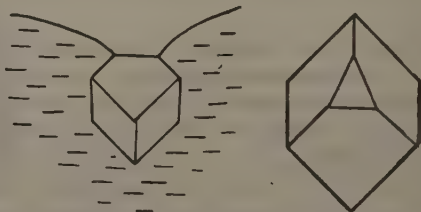
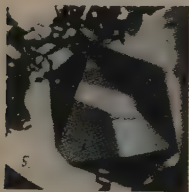


Abb. 5/a An der Oberfläche einer NaCl Lösung schwebender Kristall (65 fache Vergrösserung)
Abb. 5/b Schematische Zeichnung der auf Abb. 5/a gezeigten photographischen Aufnahme

menden, unsichtbaren kleinen Verunreinigungen der Anlass dafür sind, dass an der Oberfläche der Lösung Kristalle entstehen. Es wurde beobachtet, dass die freie Fläche der schwimmenden Kristalle vollkommen trocken ist, obwohl diese durch eine feine Flüssigkeitsschicht in schwebendem Zustand gehalten werden. Diese freien Flächen wachsen unbehindert und bleiben dabei trocken. Abb. 5/a zeigt die photographische Aufnahme eines solchen Kristalls, während Abb. 5/b ihn schematisch darstellt. Die Lösung kommt nicht auf die Kristall-

deckfläche herauf, trotzdem zeigt die freie Fläche ein Wachstum. Der Stoff strömt oder kriecht also von der Seite her auf die Deckfläche herauf.

Auf Abb. 5/c ist die Stufenförmigkeit des Kristalls zu sehen. Bei längerer Beobachtung kann festgestellt werden, dass sich diese Vertiefungen ausfüllen (Abb. 6).



Abb. 5/c Stufen an zwei schwebenden Kristallen (65-fache Vergrößerung)

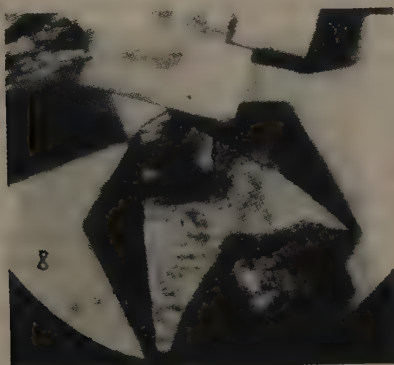


Abb. 6. Schwebender NaCl Kristall. Die Stufen werden später allmählich ausgefüllt (85-fache Vergrößerung)

Es strömt also Stoff von der Seite der Lösung in die stufenförmigen Vertiefungen des Kristalls, doch verändern sich die Berührungsstellen des Kristalls und der Lösung nicht. Diese Erscheinung kann nur damit erklärt werden, dass die Übergangsschicht von der äusseren Seite des Kristalls her in die inneren Teile vor-

dringt. Eine Übergangsschicht schiebt sich also die Kristallkanten entlang vor und dringt in die inneren Teile ein, ohne dass die Lösung die inneren Teile befeuchten würde.

5. Das Bestehen der hier beschriebenen Übergangsschicht gewinnt an Wahrscheinlichkeit, wenn auf die Überlegungen *Grafs* [6] Bezug genommen wird, in denen er die Angaben, welche die Struktur von Mosaiken und idealen Kristallen betreffen, auszuwerten sucht. Seiner Meinung nach gehört die in den Kristallen zu beobachtende Schichtung, die bei mehreren Gelegenheiten in einer Größenordnung von 0,0001—0,001 mm beobachtet werden konnte, zu den ursprünglichen Eigenschaften der Kristallstruktur. Laut *Kossel* sind die Ursachen dieser Erscheinung noch nicht festgestellt [7]. Die Meinung der Verfasser ist, dass die hier beschriebene Übergangsschicht eben für diese Schichtung als Erklärung dient. *Graf* nimmt nämlich als Erklärung für den Wachstumsmechanismus der Kristalle einen dreidimensionalen Lamellenkeim an. Die Entstehung dieses Schicht- oder Lamellenkeimes geht gerade in der Übergangsschicht vor sich, wenn sich diese umordnet. Der Gang der Umordnung ist folgender: die Bildung eines solchen Lamellenkeimes nimmt an der Spitze oder an der Kante des fertigen Kristalles seinen Anfang, und dieser Prozess setzt sich jetzt sämtlichen Flächen entlang fort. Die Übergangsschichten treten auf die Wirkung der zwischen den Kristallelementen tätigen Kräften in den physikalischen Zuständen, die in den Experimenten herrschen, notwendigerweise auf. Es muss also auf Grund des Vorausgeschickten auch die Schichtung notwendigerweise auftreten. Mit diesem Bild steht auch die Beobachtung im Einklang, wonach an der Grenze der Schichten eine Ausscheidung von fremden Stoffen — Verunreinigungen — stattfindet. Bei einem intensiven Anwachsen wird nämlich die Verunreinigung an die Oberfläche hinausgeschoben. Die sich neu bildende Schicht überdeckt sozusagen diese Verunreinigung, während sie ihrerseits die in der neuen Grenzschicht befindlichen Verunreinigungen zur gleichen Zeit an die Oberfläche stösst.

Diese Arbeit wurde im Institut für experimentelle Physik der Technischen Universität in Budapest verfasst. Der Ungarischen Akademie der Wissenschaften sei an dieser Stelle Dank für ihre wertvolle Unterstützung ausgesprochen.

LITERATUR

1. *W. Kossel*, Leipziger Vorträge, 1928.
2. *Z. Gyulai*, Zs. f. Kristallogr. **91**, 142, 1935.
3. *Z. Gyulai*, Acta Bolyai I. 1946. 8—14. Cluj-Kolozsvár.
4. *G. W. Bunn*, und *H. Emmeth*, Discussion of the Faraday Society, No. 5, 1949.
5. *G. W. Bunn*, Concentration Gradient and the Rates of Growth of Crystals. Discussion of the Faraday Society, No. 5, 1949.
6. *L. Graf*, Zs. Elektrch. **48**, 181, 1942.
7. *D. Kossel*, Physics of Solids, 36, 1947.

ПЕРЕХОДНЫЙ ГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ МЕЖДУ РАСТУЩИМ КРИСТАЛЛОМ И ЕГО РАСТВОРОМ

З. Дьюлаи и Ш. Билек

Резюме

Авторы считают, что между кристаллом и его раствором, на поверхности кристалла образуется переходный граничный слой и что прирост новых ионов к кристаллу происходит через посредничество этого граничного слоя. Этот переходный граничный слой образуется таким образом, что ионные силы кристалла организуют находящиеся в перенасыщенном растворе ионы, а также диполи молекул воды. После этого ионы граничного слоя, согласно правила острия и ребра Косселя, перестраиваются сразу в больших площадях, в следствие чего находящиеся здесь молекулы воды вытесняются.

Это воззрение означает приближение атомистического взгляда Косселя к экспериментальным условиям. Процессы, зафиксированные в приведенных микроснимках, могут быть объяснены этим воззрением и таким образом служат как то экспериментальным доказательством.

DREHIMPULS IN DER QUANTENTHEORIE DER WELLENFELDER

von
G. MARX

INSTITUT FÜR PHYSIK DER EÖTVÖS-UNIVERSITÄT IN BUDAPEST.

(Vorgelegt von K. F. Novobátzky. — Eingegangen 25. IV. 1951.)

Es wird gezeigt, dass der symmetrische Energie-Impuls-Tensor im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie auch für Wellenfelder, beschrieben durch eine Lagrange-Funktion höherer Ordnung, dargestellt werden kann. Der Drehimpuls des Feldes ist eindeutig zerlegbar in Bahn- und Spin-Moment. Der Spin ist bestimmt durch die Transformations-Eigenschaften der Zustandsfunktion. Ähnliche Resultate ergeben sich auch für den Feldimpuls.

§ 1. Einleitung

Der Drehimpuls—Operator eines Teilchens kann in der Quantenmechanik nach H. Weyl [1] folgendermassen konstruiert werden:

$$\begin{aligned} M_1 &= \frac{\hbar}{i} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2 + I_{23}), \\ M_2 &= \frac{\hbar}{i} (x_3 \partial_1 - x_1 \partial_3 + I_{31}), \\ M_3 &= \frac{\hbar}{i} (x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1 + I_{12}). \end{aligned} \quad (1)$$

Die Matrizen I_{ik} beschreiben die Änderung der Zustandsfunktionskomponenten ψ_μ infolge einer infinitesimalen Lorentz-Transformation

$$x'_i = (\delta_{ik} + \varepsilon_{ik}) x_k, \quad \varepsilon_{ik} = -\varepsilon_{ki}$$

gemäss

$$\delta \psi_\mu = \frac{1}{2} \varepsilon_{ik} I_{ik}^{\mu\nu} \psi_\nu. \quad (2)$$

Man nennt den Operator mit den Komponenten

$$L_1 = \frac{\hbar}{i} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) \quad (3)$$

usw. *Bahn-Moment* und

$$S_1 = \frac{\hbar}{i} I_{23} \quad (4)$$

usw. *Spin-Moment* des Teilchens. Alle diese Momenten-Operatoren genügen folgenden Vertauschungs-Relationen [2]:

$$[M_1, M_2] = -\frac{\hbar}{i} M_3, \quad (5)$$

$$[L_1, L_2] = -\frac{\hbar}{i} L_3, \quad (6)$$

$$[S_1, S_2] = -\frac{\hbar}{i} S_3 \quad (7)$$

und allen, die daraus nach zyklischer Vertauschung der Indizes folgen.

Im Falle eines *Feldes* hat man die Komponenten des Drehimpulses auf andere Art zu konstruieren. Man definiert die Momenten-Dichte

$$M_{ikr} = x_i T_{kr} - x_k T_{ir}, \quad (8)$$

wo T_{ik} den Energie-Impuls-Tensor bedeutet. Die Komponenten des gesamten Drehimpulses des Feldes sind

$$\begin{aligned} M_1 &= \frac{1}{ic} \int M_{234} dV, \\ M_2 &= \frac{1}{ic} \int M_{314} dV, \\ M_3 &= \frac{1}{ic} \int M_{124} dV. \end{aligned} \quad (9)$$

Man hat über den ganzen dreidimensionalen Raum zu integrieren. Infolge der Erhaltung der Energie und des Impulses ist der Energie-Impuls-Tensor divergenzfrei:

$$\partial_r T_{ir} = 0.$$

Um die Erhaltung des Drehimpulses zu sichern gemäss

$$\partial_r M_{ikr} = T_{ki} - T_{ik} = 0,$$

folgt man die Symmetrie des Energie-Impuls-Tensors. Der symmetrische Energie-Impuls-Tensor wird nach *D. Hilbert* [3] durch die Änderung des Wirkungsintegrals

$$I = \int L \sqrt{g} dx, \quad (10)$$

$$dx = dx^1 dx^2 dx^3 dx^4$$

gebildet, wenn man den metrischen Fundamentaltensor g_{ik} variiert:

$$\delta I = \frac{1}{2} \int T^{ik} \delta g_{ik} \sqrt{g} dx. \quad (11)$$

(Diese Definition sichert von selbst die Symmetrie des Energie-Impuls-Tensors, da die g_{ik} symmetrisch sind.) Man bekommt den Operator der Drehimpuls-Komponenten des Feldes, wenn man den Integrand in \mathbf{M}_k durch die Zustandsfunktionen $\psi_\mu(x)$ und die kanonisch-konjugierten »Impulse« $\pi_\nu(x)$ ausdrückt und diese mit Operatoren darstellt, die durch die Vertauschungs-Relationen

$$[\pi_\nu(x, t) \psi_\mu(x', t)] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\nu} \delta(x - x')$$

charakterisiert sind. (Alle anderen Funktionen-Paare sind vertauschbar.)

Scheinbar stehen die eben definierten Operatoren \mathbf{M}_k mit den Drehimpuls-Komponenten \mathbf{M}_k eines Elementarteilchens in keinem näheren Zusammenhang. Die innere Verwandtschaft des Drehimpulses des Feldes und des Teilchen-Drehimpulses wurde von L. Rosenfeld gezeigt [4]. Es bestehen nämlich folgende Relationen im Falle der Lagrange-Funktion erster Ordnung:

$$\mathbf{M}_1 = - \int \pi(x) [x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2 + I_{23}] \psi(x) dV = - \frac{i}{\hbar} \int \pi(x) \mathcal{M}_1 \psi(x) dV. \quad (12)$$

Diese »kanonische Form« ermöglicht die Zerlegung des Drehimpulses auch eines Feldes in ein Bahn-Moment, welches durch die Energie-Strömungen entsteht und in den Spin, welcher von ihnen unabhängig ist:

$$\mathbf{M}_k = \mathbf{L}_k + \mathbf{S}_k, \quad (15)$$

wo zum Beispiel

$$\mathbf{L}_1 = - \int \pi(x) [x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2] \psi(x) dV = - \frac{i}{\hbar} \int \pi(x) \mathcal{L}_1 \psi(x) dV \quad (14)$$

und

$$\mathbf{S}_1 = - \int \pi(x) I_{23} \psi(x) dV = - \frac{i}{\hbar} \int \pi(x) \mathcal{S}_1 \psi(x) dV \quad (15)$$

sind.

Wir möchten zeigen, dass dieser Zusammenhang auch auf Felder, beschrieben durch eine Lagrange-Funktion *höherer Ordnung*, erstreckbar ist. Die kanonische Form des Drehimpulses ermöglicht die Verifikation der Vertauschungs-Relationen

$$[\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2] = - \frac{\hbar}{i} \mathbf{M}_3, \quad (16)$$

$$[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2] = - \frac{\hbar}{i} \mathbf{L}_3, \quad (17)$$

$$[\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2] = - \frac{\hbar}{i} \mathbf{S}_3, \quad (18)$$

die den Relationen (5), (6) und (7) gleichen. Diese Ähnlichkeit zeigt die Verwandtschaft zwischen *Feld* und *Teilchen* noch weiter. Es ist noch bemerkens-

wert, dass der Gesamt-Drehimpuls- und Spin-Operator des Feldes durch die Transformations-Eigenschaften der Zustandsfunktion bestimmt und von der Form der Feldgleichungen unabhängig sind.

Einen ähnlichen Zusammenhang kann man auch zwischen dem Impuls-Operator eines Elementarteilchens

$$\mathcal{P}_k = \frac{\hbar}{i} \partial_k$$

und dem Gesamtimpuls des Feldes finden. Der Feldimpuls wird mit Hilfe des symmetrischen Energie-Impuls-Tensors definiert durch:

$$\mathbf{P}_k = \frac{1}{ic} \int T_{k4} dV.$$

Bei einer Lagrange-Funktion erster Ordnung bestehen die folgende Relationen:

$$\mathbf{P}_k = - \int \pi(x) \partial_k \psi(x) dV = - \frac{i}{\hbar} \int \pi(x) \mathcal{P}_k \psi(x) dV. \quad (19)$$

Diese sind analog zu den Relationen (12), (14) und (15). Dieser Zusammenhang besteht auch dann, wenn die Feldgleichungen (und damit die Lagrange-Funktion) höherer Ordnung sind.

Für den Beweis der Relationen (12) verallgemeinern wir den Rosenfeldschen Gedankengang. Wir konstruieren hier den symmetrischen Energie-Impuls-Tensor im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie und bilden daraus nach Gleichungen (8) und (9) die Drehimpuls-Komponenten. Die Konstruktion des symmetrischen Tensors geschieht nach der verallgemeinerten Methode von *F. Belinfante* [5], [6], [7]. Unsere Rechnung hat viele Züge mit den Arbeiten von *J. S. de Wet* [8] und *T. S. Chang* [9] gemein. Wir geben die Rechnung der Übersichtlichkeit halber zuerst im Falle einer Lagrange-Funktion zweiter Ordnung in §§ 2 und 3 wieder, der allgemeine Beweis folgt in §§ 4 und 5. § 7 enthält die Verifizierung der Vertauschungs-Relationen (16), (17) und (18). § 7 die Untersuchung des Feldimpulses und der Feldenergie. Wir prüfen endlich das Verhalten solcher Lagrange-Funktionen, die auch nicht variierbare Grösse enthalten, in § 8.

§ 2. Energie-Impuls-Tensor gebildet aus einer Lagrange-Funktion zweiter Ordnung

Wir nehmen an, dass die Lagrange-Funktion von den folgenden Variablen abhängt:

$$\psi_\mu, \psi_{\mu r}, \psi_{\mu rs}; \mathcal{E}_{ab}, \mathcal{E}_{abr}, \mathcal{E}_{abrs}.$$

Hier ist

$$\psi_{\mu r_1 r_2 \dots r_n} = \partial_{r_1} \partial_{r_2} \dots \partial_{r_n} \psi_\mu,$$

und es bedeutet

$$\mathcal{E}^{ab} r_1 r_2 \dots r_n = \partial_{r_1} \partial_{r_2} \dots \partial_{r_n} \mathcal{E}^{ab}.$$

Wenn man die Dichte-Funktionen (Skalare, Vektoren, Tensoren multipliziert mit \sqrt{g}) durch gotische Buchstaben bezeichnet, nimmt das Wirkungsintegral (10) die Gestalt an

$$\mathbf{I} = \int \mathfrak{L} dx.$$

Wir setzen voraus, dass die Eulerschen Gleichungen

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_\mu} - \partial_r \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu r}} + \partial_r \partial_s \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu rs}} = 0 \quad (20)$$

bestehen.

Machen wir eine infinitesimale Koordinatentransformation

$$x^{i'} = x^i + \xi^i(x), \quad (21)$$

so wird die Änderung der Feldfunktion ψ_μ durch den Ausdruck

$$\frac{\partial x^{i'}}{\partial x^k} = \delta_k^i + \partial_k \xi^i,$$

oder durch die infinitesimalen Größen

$$\xi_k^i = \partial_k \xi^i$$

eindeutig bestimmt. Die Variation von ψ_μ nimmt etwa folgende Form an:

$$\delta \psi_\mu = \psi'_\mu(x') - \psi_\mu(x) = \mathcal{J}_{\mu r}^{vs} \psi_v \xi_s^r. \quad (22)$$

Die Größen $\mathcal{J}_{\mu r}^{vs}$ werden durch die Transformations-Eigenschaften von ψ_μ bestimmt. Wir unterscheiden die *lokale Variation* [10]

$$\delta^* \psi_\mu = \psi'_\mu(x) - \psi_\mu(x)$$

von der *totalen Variation* $\delta \psi_\mu$. Offenbar besteht die Relation

$$\delta \psi_\mu = \delta^* \psi_\mu + \psi_{\mu r} \xi^r,$$

also

$$\delta^* \psi_\mu = \mathcal{J}_{\mu r}^{vs} \psi_v \xi_s^r - \psi_{\mu r} \xi^r. \quad (23)$$

Man kann leicht zeigen [10], dass die Variation δ^* und der Differentialoperator ∂_r vertauschbar sind:

$$\delta^* \psi_{\mu r} = \partial_r \delta^* \psi_\mu.$$

Die Variationen von g_{ab} sind infolge der Koordinatentransformation (21) speziell

$$\begin{aligned}\delta g_{ab} &= -g_{ar} \xi_b^r - g_{rb} \xi_a^r, \\ \delta^* g_{ab} &= -g_{ar} \xi_b^r - g_{rb} \xi_a^r - g_{abr} \xi^r.\end{aligned}\quad (24)$$

Die formale Änderung des Wirkungsintegrals kann man folgendermassen schreiben [10]:

$$\delta I = \int [\delta^* \mathfrak{L} + \partial_k (\mathfrak{L} \xi^k)] dx. \quad (25)$$

Diese Änderung ist aber gleich Null, da das Wirkungsintegral invariant sein muss. Ausführlich geschrieben¹

$$\begin{aligned}\delta I = \int \left[\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_\mu} \delta^* \psi_\mu + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu r}} \delta^* \psi_{\mu r} + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu rs}} \delta^* \psi_{\mu rs} + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ab}} \delta^* g_{ab} + \right. \\ \left. + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abr}} \delta^* g_{abr} + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abrs}} \delta^* g_{abrs} + \partial_k (\mathfrak{L} \xi^k) \right] dx = 0.\end{aligned}$$

Nach partieller Integration und mit Hilfe der Eulerschen Gleichungen (20) bekommt man

$$\begin{aligned}\delta I = \int \left[\frac{\delta I}{\delta g_{ik}} \delta^* g_{ik} + \partial_k \left\{ \mathfrak{L} \xi^k + \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu k}} - \partial_s \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu ks}} \right) \delta^* \psi_\mu + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu kr}} \delta^* \psi_{\mu r} + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ab}} - \partial_s \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abks}} \right) \delta^* g_{ab} + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abkr}} \delta^* g_{abr} \right\} \right] dx = 0.\end{aligned}$$

Aber gemäss der Definition (11) ist

$$\frac{\delta I}{\delta g_{ik}} \equiv \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ik}} - \partial_r \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ikr}} + \partial_r \partial_s \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ikrs}} = \frac{1}{2} \mathfrak{L}^{ik}.$$

Infolgedessen ist mit Rücksicht auf (23) und (24)

$$\begin{aligned}\delta I = - \int [\mathfrak{L}_r^r \xi_k^r + \frac{1}{2} \mathfrak{L}^{ik} g_{ikr} \xi^r] dx + \\ + \int [\partial_k [\Theta_i^{rk} \xi^i + \mathfrak{B}_{..i}^{kr} \xi_r^i + \mathfrak{B}_{...i}^{krs} \xi_{rs}^i] dx = 0,\end{aligned}$$

wo

$$\begin{aligned}\Theta_i^{rk} = \mathfrak{L} \delta_i^k - \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu k}} - \partial_s \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu ks}} \right) \psi_{\mu i} - \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu kr}} \psi_{\mu r} - \\ - \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abk}} - \partial_s \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abks}} \right) \xi_{abi} - \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{abkr}} \xi_{abir},\end{aligned}\quad (26)$$

¹ Wir gebrauchen die gewöhnliche Summationsvorschrift: Die doppelt vorkommenden lateinischen Indizes hat man von 1 bis 4, die doppelt vorkommenden griechischen Indizes von 1 bis zur Komponentenzahl von ψ zu summieren.

$$\begin{aligned}
\mathfrak{B}_{..i}^{kr} = & \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu k}} - \partial_s \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu ks}} \right) J_{\mu i}^{vr} \psi_\nu + \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu ks}} \partial_s (J_{\mu i}^{vr} \psi_\nu) - \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu kr}} \psi_{\mu i} - \\
& - 2 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial g_{ark}} - \partial_s \frac{\partial \Omega}{\partial g_{arsk}} \right) g_{ai} - 2 \frac{\partial \Omega}{\partial g_{arsk}} g_{ais} - \frac{\partial \Omega}{\partial g_{abkr}} g_{abi}, \\
\mathfrak{B}_{...i}^{krs} = & \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu kr}} J_{\mu i}^{rs} \psi_\nu - 2 \frac{\partial \Omega}{\partial g_{arsk}} g_{ai}.
\end{aligned} \quad (27)$$

Nach einer partiellen Integration wird

$$\delta I = \int \left[\partial_k \mathfrak{I}_r^k - \frac{1}{2} \mathfrak{I}^{ik} g_{ikr} \right] \xi^r dx + \int \partial_k [\mathfrak{B}_{..i}^k \xi^i + \mathfrak{B}_{..i}^{kr} \xi_r^i + \mathfrak{B}_{...i}^{krs} \xi_{rs}^i] dx = 0, \quad (28)$$

wo

$$\mathfrak{B}_{..i}^k = \Theta_i^k - \mathfrak{I}_i^k \quad (29)$$

bedeutet. Das zweite Integral ist nach den Satz von Gauss in ein Oberflächenintegral umformbar. Wenn man die ξ^i so wählt, dass sie und ihre ersten und zweiten Ableitungen auf der Oberfläche verschwinden, bekommt man aus (28)

$$\int \left[\partial_k \mathfrak{I}_r^k - \frac{1}{2} \mathfrak{I}^{ik} g_{ikr} \right] \xi^r dx = 0.$$

Infolge der beliebigen Wahl der Funktionen ξ^r muss der Integrand verschwinden, also T_{ik} ist divergenzfrei:

$$\nabla_k T_r^k = \frac{1}{\sqrt{g}} [\partial_k \mathfrak{I}_r^k - \frac{1}{2} \mathfrak{I}^{ik} g_{ikr}] = 0. \quad (30)$$

Wenn aber die ξ^i und ihre Ableitungen auf der Oberfläche nicht verschwinden, ist gemäss (28) und (30)

$$\delta I = \int \partial_k [\mathfrak{B}_{..i}^k \xi^i + \mathfrak{B}_{..i}^{kr} \xi_r^i + \mathfrak{B}_{...i}^{krs} \xi_{rs}^i] dx = 0.$$

Führt man die Differentiation aus, so bekommt man:

$$\delta I = \int \left[(\partial_k \mathfrak{B}_{..i}^k) \xi^i + (\mathfrak{B}_{..i}^r + \partial_k \mathfrak{B}_{..i}^{kr}) \xi_r^i + (\mathfrak{B}_{..i}^{rs} + \partial_k \mathfrak{B}_{...i}^{krs}) \xi_{rs}^i + \mathfrak{B}_{...i}^{krs} \xi_{krs}^i \right] dx = 0.$$

Da die ξ^i willkürlich und deshalb ξ^i , ξ_r^i , ξ_{rs}^i und ξ_{krs}^i in jedem gegebenen Punkt frei wählbar sind [8], folgt

$$\partial_k \mathfrak{B}_{..i}^k = 0, \quad (31)$$

$$\mathfrak{B}_{..i}^r + \partial_k \mathfrak{B}_{..i}^{kr} = 0, \quad (32)$$

$$\mathfrak{B}_{..i}^{rs} + \partial_k \mathfrak{B}_{...i}^{krs} = \text{antisymmetrisch in } r, s, \quad (33)$$

$$\mathfrak{B}_{...i}^{krs} = \text{antisymmetrisch in } k, r, s. \quad (34)$$

Aus (33) und (34) folgt

$$\mathfrak{B}_{..i}^{rs} = -\mathfrak{B}_{..i}^{sr}. \quad (35)$$

Aus (29), (30) und (31) folgt

$$\partial_k \Theta_i^k = \partial_k \mathfrak{T}_i^k = \frac{1}{2} \mathfrak{T}^{ik} g_{ikr}, \quad (36)$$

und aus (29) und (32) folgt

$$\mathfrak{T}_i^k = \Theta_i^k + \partial_r \mathfrak{B}_{..i}^{rk}. \quad (37)$$

Wir wollen unsere Resultate auf den Fall euklidischer Metrik anwenden, wo

$$g_{ik} = \delta_{ik} \equiv \begin{cases} 1, & \text{wenn } i = k, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

ist. Der Unterschied verschwindet zwischen den kovarianten und kontravarianten Indizes, Tensor wird gleich Tensordichte, deshalb bekommt man aus (37)

$$T_{ik} = \Theta_{ik} + \partial_r B_{rki}. \quad (38)$$

Der Tensor $\Theta_{\mu i}$ ist bei euklidischer Metrik mit dem *kanonischen Energie-Impuls-Tensor* identisch [9], [11]:

$$\Theta_{ik} = L \delta_{ik} - \left(\frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu k}} - \partial_s \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu ks}} \right) \psi_{\mu i} - \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rk}} \psi_{\mu r i}, \quad (39)$$

und ist infolge (36) divergenzfrei. Θ_{ik} ist auch im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie gemäss (39) leicht konstruierbar. In dem Ausdruck von T_{ik} erscheint noch die Grösse

$$\begin{aligned} B_{rki} = & \left(\frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu r}} - \partial_s \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rs}} \right) J_{\mu i}^{\nu k} \psi_{\nu} + \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rs}} \partial_s (J_{\mu i}^{\nu k} \psi_{\nu}) - \\ & - \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu kr}} \psi_{\mu i} - 2 \left[\frac{\partial L}{\partial g_{ikr}} - \partial_s \frac{\partial L}{\partial g_{ikrs}} \right] g_{ik} = \delta_{ik} \end{aligned}$$

Wenn wir die B_{rki} auch konstruieren können, so können wir T_{ik} ohne die Zuhilfnahme der kovarianten Gestalt der Lagrange-Funktion berechnen. Diese Konstruktion ist aber möglich. Man bilde

$$B_{rik} - B_{rki} = S_{ikr} + Q_{ikr}, \quad (40)$$

wo

$$S_{ikr} = -S_{kir} = \left(\frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu r}} - \partial_s \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rs}} \right) (J_{\mu k}^{\nu i} - J_{\mu i}^{\nu k}) \psi_{\nu} + \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rs}} \partial_s (J_{\mu k}^{\nu i} - J_{\mu i}^{\nu k}) \psi_{\nu},$$

$$Q_{ikr} = -Q_{kir} = \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu kr}} \psi_{\mu i} - \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu ir}} \psi_{\mu k}. \quad (41)$$

Der Ausdruck

$$J_{\mu k}^{\nu i} - J_{\mu i}^{\nu k}$$

hat aber eine einfache Bedeutung. Wenn die infinitesimale Transformation (21) eine Lorentz-Transformation ist, das heisst

$$\xi^i = \varepsilon_{ik} x_k, \quad \varepsilon_{ik} = -\varepsilon_{ki},$$

dann ist die Änderung der Funktion ψ_μ nach (22)

$$\delta \psi_\mu = J_{\mu i}^{\nu k} \psi_\nu \varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ik} (J_{\mu i}^{\nu k} - J_{\mu k}^{\nu i}) \psi_\nu.$$

Ein Vergleich mit Gleichung (2) zeigt, dass

$$J_{\mu i}^{\nu k} - J_{\mu k}^{\nu i} = I_{ik}^{\mu \nu} \quad (42)$$

ist, wo die $I_{ik}^{\mu \nu}$ nicht mehr Funktionen, sondern Zahlen sind, nämlich die Elemente der Lorentz-Transformations-Matrizen I_{ik} von ψ_μ . Gemäss diesem Resultat ist

$$S_{ikr} = - \left(\frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu r}} - \partial_s \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rs}} \right) I_{ik}^{\mu \nu} \psi_\nu - \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu rs}} I_{ik}^{\mu \nu} \psi_{\nu s}. \quad (43)$$

Man sieht, dass nach (43) die S_{ikr} und nach (41) die Q_{ikr} leicht herstellbar sind ohne die Verwendung nichteuklidischer Metrik. B_{ikr} ist aber durch (40) und (35) eindeutig bestimmt. Addiert man die Gleichungen

$$B_{rik} - B_{rki} = -S_{kir} - Q_{kir},$$

$$B_{irk} - B_{ikr} = S_{rki} + Q_{rki},$$

$$B_{kir} - B_{kri} = -S_{irk} - Q_{irk},$$

dann bekommt man

$$B_{rki} = -\frac{1}{2} (S_{rki} - S_{kir} - S_{irk} + Q_{rki} - Q_{kir} - Q_{rik}). \quad (44)$$

Es gelang uns also in (44) die B_{rki} nur gemäss der Methode der speziellen Relativitätstheorie darzustellen. Die Konstruktion des symmetrischen Energie-Impuls-Tensors (definiert durch die allgemein-kovariante Relation (11)) kann also ohne die Verwendung der kovarianten Gestalt der Lagrange-Funktion folgendermassen geschehen: Man berechne den kanonischen Energie-Impuls-Tensor (39) und die Funktionen (41) und (43). Daraus bilde man den Ausdruck (44). Dann ist der symmetrische Energie-Impuls-Tensor nach (38) leicht berechenbar. (Diese Rechnung ist im Falle einer Lagrange-Funktion zweiter Ordnung anwendbar. Die Verallgemeinerung auf Lagrange-Funktionen höherer Ordnung folgt in § 4.)

§ 3. Impuls und Drehimpuls im Falle einer Lagrange-Funktion zweiter Ordnung

Da der symmetrische Energie-Impuls-Tensor bekannt ist, kann man den Drehimpuls des Feldes berechnen. Nach der Definition (8) ist

$$\begin{aligned} M_{ikr} &= x_i T_{kr} - x_k T_{ir} = \\ &= x_i \Theta_{kr} - x_k \Theta_{ir} + x_i \partial_s B_{srk} - x_k \partial_s B_{sri} = \\ &= x_i \Theta_{kr} - x_k \Theta_{ir} - B_{irk} + B_{kri} + \partial_s (x_i B_{srk} - x_k B_{sri}) = \\ &= x_i \Theta_{kr} - x_k \Theta_{ir} + Q_{ikr} + S_{ikr} + \partial_s (x_i B_{srk} - x_k B_{sri}). \end{aligned} \quad (45)$$

Die x -Komponente des Gesamt-Drehimpulses ist nach (9)

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1 &= \frac{1}{ic} \int (x_2 \Theta_{34} - x_3 \Theta_{24} + Q_{234}) dV + \frac{1}{ic} \int S_{234} dV + \\ &+ \frac{1}{ic} \int \partial_s (x_2 B_{s43} - x_3 B_{s42}) dV. \end{aligned}$$

Da B_{sik} nach (35) antisymmetrisch sind, also

$$B_{44k} = 0,$$

ist der letzte Integrand in dem Ausdruck von \mathbf{M}_1 eine räumliche Divergenz. Man kann dies nach dem Satz von Gauss in ein Oberflächen-Integral umformen, das auf der unendlich entfernten Randfläche verschwindet. Es bleibt nur

$$\mathbf{M}_1 = \mathbf{L}_1 + \mathbf{S}_1, \quad (46)$$

wo

$$\mathbf{L}_1 = \frac{1}{ic} \int (x_2 \Theta_{34} - x_3 \Theta_{24} + Q_{234}) dV \quad (47)$$

und

$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{ic} \int S_{234} dV \quad (48)$$

ist. Wir berechnen nun die konkrete Form von \mathbf{S}_1 . Wenn man die Ableitungen nach der Zeit

$$t = \frac{x_4}{ic}$$

mit einem Punkt bezeichnet, wird

$$S_1 = - \int I_{23}^{\mu\nu} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} - \sum_{s=1}^3 \partial_s \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} - \partial_t \frac{\partial L}{\partial \ddot{\psi}_\mu} \right) \dot{\psi}_\nu + \sum_{s=1}^3 \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} \dot{\psi}_{\nu s} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{\psi}_\mu} \ddot{\psi}_\nu \right] dV.$$

Nach einer partiellen Integration bekommt man nach Weglassen des Oberflächenintegrals

$$S_1 = - \int I_{23}^{\mu\nu} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} - 2 \sum_{s=1}^3 \partial_s \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} - \partial_t \frac{\partial L}{\partial \ddot{\psi}_\mu} \right) \dot{\psi}_\nu + \frac{\partial L}{\partial \ddot{\psi}_\mu} \ddot{\psi}_\nu \right] dV.$$

Wir führen hier die kanonischen Funktionen ein. Es ist bekannt [11], [12], dass es im Falle einer Lagrange-Funktion zweiter Ordnung zwei kanonisch-konjugierte Funktionen-Paare gibt. Diese sind:

$$\begin{aligned}\varphi_{\mu}^{(1)} &= \psi_{\mu} \text{ und } \pi_{\mu}^{(1)} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu}} - 2 \sum_{s=1}^3 \partial_s \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} - \partial_t \frac{\partial L}{\partial \ddot{\psi}_{\mu}}, \\ \varphi_{\mu}^{(2)} &= \dot{\psi}_{\mu} \text{ und } \pi_{\mu}^{(2)} = \frac{\partial L}{\partial \ddot{\psi}_{\mu}}.\end{aligned}\quad (49)$$

Bei der Quantelung des Feldes werden diese Funktionen durch Operatoren dargestellt, welche den Vertauschungs-Relationen

$$[\pi_{\mu}^{(i)}(x, t), \varphi_{\nu}^{(k)}(x', t)] = \frac{\hbar}{i} \cdot \delta_{\mu\nu} \delta_{ik} \delta(x - x') \quad (50)$$

genügen. (Alle andere Operatoren-Paare sind vertauschbar.) Mit Hilfe der kanonischen Variablen kann S_1 in folgender einfachen Gestalt geschrieben werden:

$$S_1 = - \int [\pi_{\mu}^{(1)} I_{23}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(1)} + \pi_{\mu}^{(2)} I_{23}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(2)}] dV. \quad (51)$$

Oder nach (4) in Matrizen-Schreibweise:

$$S_1 = - \frac{i}{\hbar} \int [\pi^{(1)} S_1 \varphi^{(1)} + \pi^{(2)} S_1 \varphi^{(2)}] dV. \quad (52)$$

Eine analoge Rechnung ergibt

$$L_1 = - \int [\pi_{\mu}^{(1)} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) \varphi_{\mu}^{(1)} + \pi_{\mu}^{(2)} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) \varphi_{\mu}^{(2)}] dV, \quad (53)$$

oder nach (3)

$$L_1 = - \frac{i}{\hbar} \int [\pi^{(1)} \mathcal{L}_1 \varphi^{(1)} + \pi^{(2)} \mathcal{L}_1 \varphi^{(2)}] dV.$$

Daraus ist nach (46)

$$\begin{aligned}M_1 &= - \int [\pi^{(1)} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2 + I_{23}) \varphi^{(1)} + \pi^{(2)} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2 + I_{23}) \varphi^{(2)}] dV = \\ &= - \frac{i}{\hbar} \int [\pi^{(1)} \mathcal{M}_1 \varphi^{(1)} + \pi^{(2)} \mathcal{M}_1 \varphi^{(2)}] dV.\end{aligned}\quad (54)$$

Man sieht, dass die Zerlegung des Gesamt-Drehimpulses des Feldes gemäss (46) die natürliche Zerlegung in Spin- und Bahn-Moment ist. (51) gibt den Spin-Operator und (53) den Bahn-Moment-Operator des Feldes. Diese sind die natürlichen Verallgemeinerungen von (14) und (15).

Wir möchten noch den Feldimpuls mit Hilfe kanonischer Variablen konstruieren. Definitionsgemäss ist der Feldimpuls

$$P_k = \frac{1}{ic} \int T_{k4} dV.$$

Nach der Gleichung (38) ist dies

$$\mathbf{P}_k = \frac{1}{ic} \int \Theta_{k4} dV + \frac{1}{ic} \int \partial_s B_{s4k} dV. \quad (55)$$

Infolge der Antisymmetrie von B_{sik} ist

$$B_{44k} = 0,$$

also ist der zweite Integrand in (55) eine räumliche Divergenz, sodass das Integral in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden kann, welches auf der unendlichfernen Grenzfläche verschwindet. Es bleibt nur infolge (39) für $k = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_k &= - \int \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} - \partial_s \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} \right) \psi_{\mu k} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} \psi_{\mu s k} \right] dV = \\ &= - \int \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} - \sum_{s=1}^3 \partial_s \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} - \partial_t \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} \right) \psi_{\mu k} + \sum_{s=1}^3 \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} \psi_{\mu s k} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} \dot{\psi}_{\mu k} \right] dV, \end{aligned}$$

was nach einer partiellen Integration

$$\mathbf{P}_k = - \int \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} - 2 \sum_{s=1}^3 \partial_s \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu s}} - \partial_t \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} \right) \psi_{\mu k} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\mu} \dot{\psi}_{\mu k} \right] dV$$

ergibt. Dies kann mit Hilfe der kanonischen Variabeln (49) in folgender Gestalt geschrieben werden:

$$\mathbf{P}_k = - \int [\pi_\mu^{(1)} \partial_k \varphi_\mu^{(1)} + \pi_\mu^{(2)} \partial_k \psi_\mu^{(2)}] dV = - \frac{i}{\hbar} \int [\pi^{(1)} \mathcal{P}_k \varphi^{(1)} + \pi^{(2)} \mathcal{P}_k \varphi^{(2)}] dV,$$

also es besteht eine ähnliche Relation zwischen Teilchenimpuls \mathcal{P}_k und Feldimpuls \mathbf{P}_k wie für die Drehimpuls-Komponenten.

Man kann auf diese Weise auch zeigen, dass die Feldenergie definiert durch

$$\mathbf{H} = - \int T_{44} dV$$

in der kanonischen Form

$$\mathbf{H} = \int [\pi_\mu^{(1)} \dot{\varphi}_\mu^{(1)} + \pi_\mu^{(2)} \dot{\varphi}_\mu^{(2)} - L] dV$$

geschrieben werden kann.

§ 4. Allgemeine Konstruktion des symmetrischen Energie-Impuls-Tensors

Nach den speziellen Berechnungen des § 2 wollen wir den allgemeinen Fall behandeln. Die Lagrange-Funktion des Feldes sei von höherer Ordnung, sie enthalte bis an die m -ten Ableitungen der Zustandsfunktionen ψ_μ und des metrischen Fundamentaltensors $g_{\mu\nu}$.

Um die langen und unübersichtlichen Formeln zu vermeiden, benutzen wir folgende Bezeichnungen (welche denen von T. S. Chang gleichen):

$$A_{(n)} B_{(n)} = A_{r_1 r_2 \dots r_n} \cdot B_{r_1 r_2 \dots r_n},$$

summiert für alle r_k von 1 bis 4,

$$A_{[n]} B_{[n]} = A_{r_1 r_2 \dots r_n} \cdot B_{r_1 r_2 \dots r_n},$$

summiert für alle r_k von 1 bis 3. Es ist zum Beispiel

$$\psi_{(n)} \partial_{(n)} F = (\partial_{r_1} \partial_{r_2} \dots \partial_{r_n} \psi) \cdot (\partial_{r_1} \partial_{r_2} \dots \partial_{r_n} F).$$

Die Feldgleichungen sind die Eulerschen Gleichungen

$$\sum_{n=0}^m (-1)^n \partial_{(n)} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu(n)}} = 0, \quad (56)$$

wo

$$\mathfrak{L} = \sqrt{g} L(\psi_\mu, \psi_{\mu r_1}, \dots, \psi_{\mu r_1 r_2 \dots r_n}; g_{ab}, g_{ab r_1}, \dots, g_{ab r_1 r_2 \dots r_n})$$

die Lagrange-Funktions-Dichte ist. Man bilde die formale Änderung des Wirkungsintegrals (10) infolge der Koordinatentransformation (21) gemäss (25).

$$\delta \mathbf{I} = \int \left[\sum_{n=0}^m \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu(n)}} \delta^* \psi_{\mu(n)} + \sum_{n=0}^m \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ab(n)}} \delta^* g_{ab(n)} + \partial_k (\mathfrak{L} \xi^k) \right] dx = 0.$$

Wenn man partiell integriert und von den Feldgleichungen (56) Gebrauch macht, bekommt man

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{I} = & \int \frac{\delta \mathbf{I}}{\delta g_{ik}} \delta^* g_{ik} dx + \int \partial_k \left[\mathfrak{L} \xi^k + \right. \\ & \left. + \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \left(\partial_{(n-s)} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu(n-s)k(s)}} \delta^* \psi_{\mu(s)} + \partial_{(n-s)} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ab(n-s)k(s)}} \delta^* g_{ab(s)} \right) \right] dx = 0. \end{aligned}$$

Nach der Definition (11) ist

$$\frac{\delta \mathbf{I}}{\delta g_{ik}} \equiv \sum_{n=0}^m (-1)^n \partial_{(n)} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{(ik)n}} = \frac{1}{2} \mathfrak{T}_{ik},$$

sodass nach einer partiellen Integration, infolge der Gleichung (24) wird:

$$\delta \mathbf{I} = \int \left[\partial_k \mathfrak{T}_r^k - \frac{1}{2} \mathfrak{T}^{ik} \xi_{ikr} \right] \xi^r dx + \int \partial_k \left[\mathfrak{L} \xi^k - \mathfrak{T}_r^k \xi^r + \right. \quad (57)$$

$$\left. + \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \left(\partial_{(n-s)} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \psi_{\mu(n-s)k(s)}} \delta^* \psi_{\mu(s)} + \partial_{(n-s)} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial g_{ab(n-s)k(s)}} \delta^* g_{ab(s)} \right) \right] dx = 0.$$

Wenn die Variationen auf der Oberfläche verschwinden, wird das zweite Integral infolge des Satzes von Gauss Null. Infolgedessen muss auch das erste Integral

verschwinden. Das Volumenintegral verschwindet aber nur dann, wenn

$$\nabla_k T_r^k = \frac{1}{\sqrt{g}} (\partial_k \mathfrak{T}_r^k - \frac{1}{2} \mathfrak{T}^{ik} g_{ikr}) = 0$$

ist, da die ξ^r willkürlich sind. Der symmetrische Energie-Impuls-Tensor ist also auch im allgemeinen Fall divergenzfrei. Deshalb gibt (57), wenn die Variationen auf der Oberfläche nicht verschwinden,

$$\delta \mathbf{I} = \int \partial_k \left[\Omega \xi^k - \mathfrak{T}_r^k \xi^r + \sum_{s=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \left(\partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu(n-s)k(s)}} \delta^* \psi_{\mu(s)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial g_{ab(n-s)k(s)}} \delta^* g_{ab(s)} \right) \right] dx = 0. \quad (58)$$

Man kann die Ableitungen von $\delta^* \psi_\mu$ und $\delta^* g_{ab}$ leicht bilden:

$$\delta^* \psi_{\mu(s)} = \partial_{(s)} \delta^* \psi_\mu = \partial_{(s)} [\mathcal{J}_{\mu r}^{\nu k} \psi_\nu \xi_r^k - \psi_{\mu r} \xi^r], \\ \delta^* g_{ab(s)} = \partial_{(s)} \delta^* g_{ab} = - \partial_{(s)} [g_{ar} \xi_b^r + g_{rb} \xi_a^r + g_{abr} \xi^r].$$

Nach der Durchführung der Differentiation wird

$$\sum_{s=0}^n X_{(s)} \delta^* \psi_{\mu(s)} = \sum_{s=0}^n X_{(s)} \xi_k^r \partial_{(s)} (\mathcal{J}_{\mu r}^{\nu k} \psi_\nu) - \sum_{s=0}^n X_{(s)} \xi^r \psi_{\mu r(s)} - \\ - \sum_{s=1}^n s X_{(s-1)}^i \xi_i^r \psi_{\mu r(s-1)} + \dots,$$

wo $X_{(s)}$ eine beliebige Grösse bedeutet. Die drei Punkte stehen anstelle der Glieder erhaltend Ableitungen zweiter und höherer Ordnung von ξ^r . Ein ähnlicher Ausdruck gilt für g_{ab} . Nach diesem Resultat wird die Variation des Wirkungsintegrals gemäss (58)

$$\delta \mathbf{I} = \int \partial_k [\mathfrak{B}_{..i}^k \xi^i + \mathfrak{B}_{..i}^{kr} \xi_r^i + \mathfrak{B}_{...i}^{krs} \xi_{rs}^i + \dots + \mathfrak{B}_{...i}^{k(m)} \xi_{(m)}^i + \dots + \mathfrak{B}_{...i}^{(m)} \xi_{(m)}^i] dx = 0, \quad (59)$$

wo die Grössen \mathfrak{B} folgendes bedeuten:

$$\mathfrak{B}_r^k = \Theta_r^k - \mathfrak{T}_r^k,$$

$$\mathfrak{B}_{..i}^k = \sum_{s=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \left| \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu(n-s)k(s)}} \partial_{(s)} (\mathcal{J}_{\mu i}^{\nu r} \psi_\nu) - 2 \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial g_{ar(n-s)k(s)}} g_{ai(s)} \right| - \\ - \sum_{n=0}^{m-2} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} (s+1) \left| \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu(n-s)kr(s)}} \psi_{\mu i(s)} + \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial g_{ab(n-s)kr(s)}} g_{abi(s)} \right|,$$

und so fort. Es wurde mit Θ_{ik} die kanonische Energie-Impuls-Dichte bezeichnet:

$$\Theta_r^k = \Omega \delta_r^k - \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \left| \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_{\mu(n-s)k(s)}} \psi_{\mu r(s)} + \partial_{(n-s)} \frac{\partial \Omega}{\partial g_{ab(n-s)k(s)}} g_{abr(s)} \right|.$$

Dies geht in euklidischer Metrik, wo

$$g_{ik} = \delta_{ik}$$

ist, über in

$$\Theta_{ik} = L\delta_{ik} - \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(n-s)k}(s)} \psi_{\mu i}(s). \quad (60)$$

Diesen Ausdruck hat T. S. Chang [9] nach der Definition von P. Weiss [13] aus Lagrange-Funktionen höherer Ordnung berechnet.

Wenn man die Differentiation in (59) ausführt, bekommt man:

$$\delta \mathbf{I} = \int [(\partial_k \mathfrak{B}_{..i}^k) \xi^i + (\mathfrak{B}_{..i}^r + \partial_k \mathfrak{B}_{..i}^{kr}) \xi_r^i + \dots + (\mathfrak{B}_{...i}^{(n)} + \partial_k \mathfrak{B}_{...i}^{k(n)}) \xi_{(n)}^i + \dots + \mathfrak{B}_{...i}^{(m+1)} \xi_{(m+1)}^i] dx = 0.$$

Da die ξ^i und ihre Ableitungen in jedem fixen Punkt frei wählbar sind, erfordert das Verschwinden von $\delta \mathbf{I}$ das Verschwinden der einzelnen Koeffizienten von $\xi_{(n)}^i$ in dem Integrand [8]:

$$\partial_k \mathfrak{B}_{..i}^k = 0, \quad (61)$$

$$\mathfrak{B}_{..i}^r + \partial_k \mathfrak{B}_{..i}^{kr} = 0, \quad (62)$$

.....

$$\mathfrak{B}_{...i}^{(n)} + \partial_k \mathfrak{B}_{...i}^{k(n)} = \text{antisymmetrisch in den Indizes } (n), \quad (63)$$

.....

$$\mathfrak{B}_{...i}^{(m+1)} = \text{antisymmetrisch in den Indizes } (m+1). \quad (64)$$

Aus der Reihe der Gleichungen (63)–(64) folgt, dass die Grössen \mathfrak{B} in den oberen Indizes antisymmetrisch sind. Zum Beispiel ist

$$\mathfrak{B}_{..i}^{kr} = -\mathfrak{B}_{..i}^{rk}. \quad (65)$$

Aus (61) folgt auch hier die Gleichung (36) und aus (62) folgt (37). Wenn man zur euklidischen Metrik übergeht, bekommt man aus den genannten Gleichungen

$$\partial_k \Theta_{ik} = 0,$$

(auch der kanonische Energie-Impuls-Tensor ist divergenzfrei) und

$$T_{ik} = \Theta_{ik} + \partial_r B_{rki}. \quad (66)$$

Wenn $g_{ik} = \delta_{ik}$ ist, wird

$$\begin{aligned} B_{rki} &= \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(n-s)r}(s)} \partial_{(s)} (J_{\mu i}^{\nu k} \psi_{\nu}) - \\ &\quad - 2 \sum_{n=0}^{m-1} (-1)^n \partial_{(n)} \left[\frac{\partial L}{\partial g_{ik(n)r}} \right] g_{ik} = \delta_{ik} - \\ &\quad - \sum_{n=0}^{m-2} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} (s+1) \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(n-s)ir}(s)} \psi_{\nu k(s)}. \end{aligned}$$

Die antisymmetrische Kombination von B_{rki} ist auch jetzt mit Hilfe von (42) berechenbar:

$$B_{rik} - B_{rki} = S_{irk} + Q_{irk}, \quad (67)$$

wo

$$S_{ikr} = -S_{kir} = - \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu'(n-s)r(s)}} I_{ik}^{\mu\nu} \psi_{\nu(s)}, \quad (68)$$

und

$$Q_{ikr} = -Q_{kir} = - \sum_{n=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} (s+1) \left[\partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(n-s)rk(s)}} \psi_{\mu i(s)} - \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(n-s)ri(s)}} \psi_{\mu k(s)} \right] \quad (69)$$

sind. Aus (67) und (65) folgt, wie bei (44), dass

$$B_{rki} = -\frac{1}{2} (S_{rki} - S_{kir} - S_{irk} + Q_{rki} - Q_{kir} - Q_{irk}) \quad (70)$$

ist. Auf diese Weise ist aber der symmetrische Energie-Impuls-Tensor im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie auch bei Lagrange-Funktionen beliebig hoher Ordnung darstellbar: Man bilde nämlich S_{ikr} und Q_{ikr} aus (68) und (69), dann die Grösse B_{rki} gemäss (70). Daraus ist dann mit Hilfe des kanonischen Energie-Impuls-Tensors (60) der symmetrische Energie-Impuls-Tensor nach (66) darstellbar.

Die hier angeführte Methode bedurfte keiner Annahme über den Transformationscharakter der ψ_{μ} , ist also ganz allgemein dann brauchbar, wenn die Transformation der Koordinaten die Transformation der Zustandsfunktions-Komponenten eindeutig bestimmt. Der kovariant definierte symmetrische Energie-Impuls-Tensor ist durch die Lorentz-Invariant geschriebene Lagrange-Funktion und durch den Lorentz-Transformationscharakter der Zustandsfunktion ψ_{μ} eindeutig bestimmt, man braucht also die kovariante Form der Lagrange-Funktion nicht.

Es soll noch hervorgehoben werden, dass der Energie-Impuls-Tensor gebildet nach der obigen Methode, mit der zweiten Definition des von Chang gegebenen symmetrischen Tensors identisch ist [9].

§ 5. Allgemeine Konstruktion des Drehimpulses

Die Momenten-Dichte des Feldes kann man gemäss (8), (66), (67) und (45) folgendermassen schreiben:

$$M_{ikr} = x_i \Theta_{kr} - x_k \Theta_{ir} + Q_{ikr} + S_{ikr} + \partial_s (x_i B_{srk} - x_k B_{sri}).$$

Eine Komponente des Gesamt-Drehimpulses ist nach Weglassen des Oberflächenintegrals

$$\mathbf{M}_1 = \frac{1}{ic} \int (x_2 \Theta_{34} - x_3 \Theta_{24} + Q_{234} + S_{234}) dV.$$

Wir zerlegen dies in zwei Glieder:

$$\mathbf{M}_1 = \mathbf{L}_1 + \mathbf{S}_1,$$

wo jetzt

$$\mathbf{L}_1 = \frac{1}{ic} \int (x_2 \Theta_{34} - x_3 \Theta_{24} + Q_{234}) dV$$

und

$$\mathbf{S}_1 = \frac{1}{ic} \int S_{234} dV$$

ist. Wir wollen diese Ausdrücke in kanonische Form bringen, in welcher die kanonischen Funktionen erscheinen. \mathbf{S}_1 ist gemäss (68)

$$\mathbf{S}_1 = - I_{23}^{\mu\nu} \int \sum_n^{m-1} \sum_s^n (-1)^{n-s} \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu(r-s)(s)}} \psi_{\nu(s)} dV.$$

Die Doppelsumme kann auch in folgender Gestalt geschrieben werden:

$$\mathbf{S}_1 = - I_{23}^{\mu\nu} \int \sum_s^{m-1} \psi_{\nu(s)} \sum_r^{m-1-s} (-1)^r \partial_{(r)} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu(r)(s)}} dV. \quad (71)$$

Wir wollen die Ableitungen von ψ_μ nach der Zeit von denen nach den räumlichen Koordinaten absondern. Schreibt man

$$\frac{\partial^k \psi_\nu}{\partial t^k} = \psi_{\nu}^{(k)},$$

so erhält man nach einem einfachen kombinatorischen Gedankengang

$$\mathbf{S}_1 = - I_{23}^{\mu\nu} \int \sum_s^{m-1} \sum_i^s \psi_{\nu}^{(i)} \sum_r^{m-1-s} (-1)^r \partial_{(r)} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu(r)(s-i)}} dV.$$

Nach partieller Integration und Weglassen des Oberflächenintegrals bekommt man

$$\mathbf{S}_1 = - I_{23}^{\mu\nu} \int \sum_s^{m-1} \sum_i^s \psi_{\nu}^{(i)} \sum_r^{m-1-s} (-1)^{r+s-i} \partial_{(r)} \partial_{(s-i)} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_{\mu(r)(s-i)}} dV.$$

Die Doppelsumme ist wieder umformbar:

$$\mathbf{S}_1 = - I_{23}^{\mu\nu} \int \sum_i^{m-1} \psi_{\nu}^{(i)} x_{\mu}^{(i-1)} dV, \quad (72)$$

wo folgende Bezeichnung verwendet wurde:

$$\pi_{\mu}^{(i+1)} = \sum_{s=i}^{m-1} \sum_{r=0}^{m-1-s} \binom{s}{i} (-1)^{r+s-i} \partial_{(r)} \partial_{[s-i]} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(r)[s-i]}}. \quad (73)$$

Führen wir einen neuen Summationsindex $s-i = k$ ein:

$$\pi_{\mu}^{(i+1)} = \sum_{k=0}^{m-i-1} \sum_{r=0}^{m-i-1-k} \binom{k+i}{i} (-1)^{r+k} \partial_{(r)} \partial_{[k]} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(r)[k]}^{(i+1)}}.$$

Daraus folgt

$$\pi_{\mu}^{(i)} = \sum_{k=0}^{m-i} \sum_{r=0}^{m-i-k} \binom{k+i-1}{i-1} (-1)^{r+k} \partial_{(r)} \partial_{[k]} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(r)[k]}^{(i)}},$$

das heisst

$$\pi_{\mu}^{(i)} = \sum_{k=0}^{m-i} \sum_{r=0}^{m-i-k} \binom{k+i-1}{i-1} (-1)^{r+k} \partial_{(r)} \partial_{[k]} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(r)[k]}^{(i)}}.$$

Das ist aber die von mehreren Verfassern [11], [12] angegebene Form für den i -ten kanonischen Impuls. Die dazu kanonisch-konjugierte Funktion ist

$$\varphi_{\mu}^{(i)} = \psi_{\mu}^{(i-1)}.$$

Infolgedessen kann man (72) in folgender Form schreiben:

$$S_1 = -I_{23}^{\mu\nu} \int \sum_{i=0}^{m-1} \pi_{\mu}^{(i+1)} \varphi_{\nu}^{(i+1)} dV,$$

das heisst

$$S_1 = - \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} I_{23}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(i)} dV,$$

oder gemäss (4) in Matrizenschreibweise

$$S_1 = - \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^m \int \pi^{(i)} S_1 \varphi^{(i)} dV.$$

Wir haben also wiederum den Spin des Feldes vor uns, also eine Verallgemeinerung des Rosenfeldschen Resultats.

Nach einer ähnlichen, aber etwas längeren Rechnung bekommt man

$$L_1 = - \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2) \varphi_{\mu}^{(i)} dV,$$

oder infolge der Gleichung (3)

$$L_1 = - \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^m \pi^{(i)} \mathcal{L}_1 \varphi^{(i)} dV.$$

Dies ist ersichtlicherweise das Bahn-Moment des Feldes. Der Gesamt-Drehimpuls ist

$$\mathbf{M}_1 = - \sum_{i=1}^m \int \pi^{(i)} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2 + I_{23}) \varphi^{(i)} dV = - \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^m \int \pi^{(i)} \mathbf{M}_1 \varphi^{(i)} dV.$$

Diese Resultate zeigen den engen Zusammenhang zwischen dem Drehimpuls eines Elementarteilchens und dem Drehimpuls eines Kraftfeldes.

Man sieht, dass der Drehimpuls (Spin- und Bahn-Moment) in Abhängigkeit von kanonischen Variablen einfach anzugeben ist, ohne die Verwendung der Lagrange-Funktion und des ein wenig verwickelt konstruierbaren symmetrischen Energie-Impuls-Tensors. Man pflegt das Bahn-Moment aus dem kanonischen Energie-Impuls-Tensor und den Spin aus dem »symmetrisierenden Teil« zu bilden [14]. Wir sehen, dass dies nur bei einer Lagrange-Funktion erster Ordnung richtig ist, da nämlich die Q_{ikr} nur dann Null sind. Sonst muss man neben dem kanonischen Energie-Impuls-Tensor auch die Q_{ikr} zur Konstruktion des Bahn-Moments benutzen.

Man bekommt den Operator des Drehimpulses oder Spins, wenn $\varphi_\mu^{(i)}(x)$ und $\pi_\mu^{(i)}(x)$ durch solche Operatoren dargestellt werden, die den Relationen

$$[\pi_\nu^{(i)}(x, t), \varphi_\mu^{(k)}(x', t)] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\nu} \delta_{ik} \delta(x - x') \quad (75)$$

genügen, und alle anderen Variablen-Paare vertauschbar sind. Diese Operatoren sind von der Lagrange-Funktion unabhängig. Deshalb ist auch der Drehimpuls und damit auch der Spinoperator des Feldes von der Lagrange-Funktion, also von der Gestalt der Feldgleichungen unabhängig. Das ist der Fall auch bei den Elementarteilchen. Der Spin ist in beiden Fällen durch den Transformationscharakter der Zustandsfunktion eindeutig bestimmt.

Noch eine Bemerkung von prinzipiellem Interesse: Manche Verfasser erwähnen, dass die Feldgleichungen höherer Ordnung *mehrere Teilchentypen*, oder *mehrere Zustände desselben Elementarteilchens* beschreiben, da in der kanonischen Behandlung des Problems mehrere kanonisch-konjugierte Variablen-Paare auftreten. Den Spin des Feldes kann man in der Tat in folgender Form schreiben:

$$\mathbf{S}_k = \sum_{i=1}^m \mathbf{S}_k^{(i)},$$

wo $\sum_{i=1}^m \mathbf{S}_k^{(i)}$ als Summe mehrerer einfacher Spinoperatoren aufgefasst werden kann. Jeder partielle Spinoperator hat aber dieselbe Gestalt:

$$\mathbf{S}_k^{(i)} = - \frac{i}{\hbar} \int \pi^{(i)} \mathbf{S}_k \varphi^{(i)} dV.$$

deshalb haben die »verschiedenen Teilchen-Typen« denselben Spin. Man kann nicht erwarten, dass mehrere Teilchen-Typen beschrieben durch dasselbe

irreduzible Gleichungssystem verschiedene Spinwerte haben. Man kann zum Beispiel Mesonen mit Spin 0 und mit Spin $\frac{1}{2}$ nicht durch eine Feldgleichungstem höherer Ordnung darstellen.

§ 6. Vertauschungs-Relationen der Drehimpuls-Komponenten

Die kanonische Form der Gesamt-Drehimpuls-, Spin- und Bahn-Moment-Komponenten steht zu unserer Verfügung. Man kann daraus die Vertauschungs-Relationen der Momenten-Komponenten direkt bestimmen. Beginnen wir mit den Komponenten des Spinoperators.

Es ist bekannt [2], dass die Matrizen I_{ik} der infinitesimalen Lorentz-Transformation folgenden Vertauschungs-Relationen genügen :

$$\begin{aligned} [I_{23}, I_{31}] &= -I_{12}, \\ [I_{31}, I_{12}] &= -I_{23}, \\ [I_{12}, I_{23}] &= -I_{31}. \end{aligned} \quad (76)$$

Die drei Komponenten des Spinoperators sind gemäss (74) in kanonischer Form

$$\begin{aligned} S_1 &= - \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} I_{23}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(i)} dV, \\ S_2 &= - \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} I_{31}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(i)} dV, \\ S_3 &= - \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} I_{12}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(i)} dV. \end{aligned}$$

Man bilde die Vertauschungs-Relation von S_1 und S_2 .

$$\begin{aligned} [S_1, S_2] &= \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^m \iint \pi_{\mu}^{(i)}(x) I_{23}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(i)}(x) \cdot \pi_{\alpha}^{(k)}(x') I_{31}^{\alpha\beta} \varphi_{\beta}^{(k)}(x') dV dV' - \\ &\quad - \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^m \iint \pi_{\mu}^{(i)}(x) I_{31}^{\mu\nu} \varphi_{\nu}^{(i)}(x) \cdot \pi_{\alpha}^{(k)}(x') I_{23}^{\alpha\beta} \varphi_{\beta}^{(k)}(x') dV dV'. \end{aligned}$$

Infolge der Relationen (75) kann dies auch in folgender Form geschrieben werden :

$$\begin{aligned} [S_1, S_2] &= - \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^m \iint \pi_{\mu}^{(i)}(x) (I_{23}^{\mu\nu} I_{31}^{\alpha\beta} - I_{31}^{\mu\nu} I_{23}^{\alpha\beta}) \varphi_{\beta}^{(k)}(x') \delta_{\alpha\nu} \delta_{ik} \delta(x-x') dV dV' = \\ &= - \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)}(x) (I_{23} I_{31} - I_{31} I_{23})^{\mu\beta} \varphi_{\beta}^{(i)}(x) dV = \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)}(x) I_{12}^{\mu\beta} \varphi_{\beta}^{(i)}(x) dV. \end{aligned}$$

Die Vertauschungs-Relationen des Spin-Operators sind also bei den Feldern

$$[S_1, S_2] = -\frac{\hbar}{i} S_3,$$

usw. Nach ähnlicher Rechnung ergeben sich noch die Relationen

$$[L_1, L_2] = -\frac{\hbar}{i} L_3,$$

und

$$[M_1, M_2] = -\frac{\hbar}{i} M_3,$$

usw. Man sieht, dass die Momenten-Operatoren des Feldes denselben Vertauschungs-Relationen folgen, wie die Momenten-Operatoren eines Elementarteilchens (5), (6), (7).

§ 7. Kanonische Form des Feldimpulses

Der Gesamtimpuls des Feldes ist definitionsgemäss

$$\mathbf{P}_k = \frac{1}{ic} \int T_{k4} dV,$$

was man mit Hilfe von (66), (65) und (60) für $k = 1, 2, 3$ in folgender Form schreiben kann:

$$\mathbf{P}_k = \frac{1}{ic} \int \Theta_{k4} dV = - \int \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \partial_{(n-s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(n-s)(s)}} \psi_{\mu k(s)} dV.$$

(Das Oberflächenintegral wurde weggelassen.) Man kann die Doppelsumme nach dem Muster von (71) ordnen:

$$\mathbf{P}_k = - \int \sum_{i=0}^{m-1} \psi_{\mu k(i)} \sum_{s=0}^{m-1-i} (-1)^s \partial_{(s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(i)(s)}} dV.$$

Wir wollen die Ableitungen nach der Zeit von den anderen absondern:

$$\mathbf{P}_k = - \int \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{r=0}^i \binom{i}{r} \psi_{\mu k[i-r]} \sum_{s=0}^{m-1-i} (-1)^s \partial_{(s)} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(s)[i-r]}} dV.$$

Nach einer partiellen Integration und Weglassen des Oberflächenintegrals bekommt man

$$\mathbf{P}_k = - \int \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{r=0}^i \binom{i}{r} \psi_{\mu k} \sum_{s=0}^{m-1-i} \binom{i}{r} (-1)^{s+i-r} \partial_{(s)} \partial_{[i-r]} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(s)[i-r]}} dV.$$

Die Doppelsumme ist wieder umformbar nach Muster der Gleichung (72):

$$P_k = - \int \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{r=i}^{m-1} \sum_{s=0}^{m-1-r} \psi_{\mu k}^{(i)} \binom{i}{r} (-1)^{s+r-i} \partial_{(s)} \partial_{[i-r]} \frac{\partial L}{\partial \psi_{\mu(s)}^{[i-r]}} dV.$$

Dies lässt sich gemäss (73) in folgender Form schreiben:

$$P_k = - \int \sum_{i=0}^{m-1} \psi_{\mu k} \pi_{\mu}^{(i+1)} dV,$$

woraus man die kanonische Form des Feldimpulses bekommt:

$$P_k = - \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} \partial_k \varphi_{\mu}^{(i)} dV = - \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^m \int \pi_{\mu}^{(i)} \mathcal{P}_k \varphi_{\mu}^{(i)} dV.$$

Diese Relation ist die Verallgemeinerung von (19).

Wenn man $\pi_{\mu}^{(i)}$ und $\varphi_{\mu}^{(i)}$ durch Operatoren darstellt, die durch die Vertauschungs-Relationen (75) definiert sind, bekommt man den Operator des Feldimpulses. Dieser Operator ist allein durch die Ordnung m der Lagrange-Funktion bestimmt, sonst ist er von den Feldgleichungen und der Lagrange-Funktion unabhängig. Seine Eigenwerte sind also ein für allemal berechenbar. Aus diesem Grund kann man diesem Operator nicht zu viel physikalische Bedeutung zuschreiben.

Auf diesem Wege kann man auch zeigen, dass die Feldenergie definiert durch

$$H = - \int T_{44} dV$$

immer in der kanonischen Form

$$H = \int \left[\sum_{i=1}^m \pi_{\mu}^{(i)} \dot{\varphi}_{\mu}^{(i)} - L \right] dV$$

geschrieben werden kann.

§ 8. Lagrange-Funktionen mit nicht variierbaren Grössen

In manchen Problemen erscheinen in den Feldgleichungen und in dem Energie-Impuls-Tensor solche Grössen (Vektoren usw.), die keinen Euler-Lagrangeschen Gleichungen genügen. (Dies ist immer der Fall, wenn das geprüfte Feld mit seiner Umgebung in Energie- und Impuls-Austausch steht; siehe die unten folgenden Resultate.) Zum Beispiel ist das elektromagnetische Feld im Inneren verschiedener Medien (Dielektrika, Supraleiter) neben den Ladungen und Strömen durch die Daten der Feldtragenden Materie (dielektrische und magnetische Konstanten, Leitfähigkeit, Geschwindigkeit der Materie)

bestimmt [15], [16]. In solchen Problemen enthält die Lagrange-Funktion neben der Zustandsfunktion ψ_μ und dem metrischen Fundamentaltensor g_a auch andere, in allgemeinen nicht invariante Grössen. Die Änderung dieser Grössen infolge der Koordinatentransformation (21) kommt in der Variation des Wirkungsintegrals vor. In diesen Fällen müssen unsere Rechnungen modifiziert werden.

Man bezeichne die in der Lagrange-Funktion vorkommenden Variablen, die keiner Euler-Lagrangeschen Gleichungen genügen, mit u_α . Ihre Änderung infolge der Koordinatentransformation sei

$$\delta u_\alpha = K_{\alpha r}^{\beta s} u_\beta \xi_s^r,$$

also ist die lokale Variation

$$\delta^* u_\alpha = K_{\alpha r}^{\beta s} u_\beta \xi_s^r - u_{\alpha r} \xi_s^r. \quad (77)$$

In der Variation des Wirkungsintegrals werden neben den bekannten auch neue Glieder auftreten, welche von der Änderung der u_α herrühren. Man bekommt deshalb

$$\begin{aligned} \delta I = & \int \left[\sqrt{g} \nabla_k T_r^k \xi_r^i + \frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} \delta^* u_\alpha \right] dx + \\ & + \int \partial_k [(\Theta_i^k - \mathfrak{T}_i^k) \xi^i + \mathfrak{B}_{..i}^{kr} \xi_r^i + \dots] dx = 0, \end{aligned}$$

worin die Tensoren die aus dem § 4 bekannte Bedeutung haben. Infolge der Gleichung (77) wird nach einer partiellen Integration

$$\begin{aligned} \delta I = & \int \left[\sqrt{g} \nabla_k T_r^k - \frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} u_{\alpha r} - \partial_k \left(\frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} K_{\alpha r}^{\beta k} u_\beta \right) \right] \xi_r^i dx + \\ & + \int \partial_k [(\Theta_i^k - \mathfrak{T}_i^k + \frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} K_{\alpha i}^{\beta k} u_\beta) \xi^i + \mathfrak{B}_{..i}^{kr} \xi_r^i + \dots] dx = 0. \end{aligned}$$

Daraus folgt nach dem Gedankengang, der aus §§ 2 und 4 bekannt ist,

$$\nabla_k T_r^k = \frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} u_{\alpha r} + \partial_k \left(\frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} K_{\alpha r}^{\beta k} u_\beta \right) \right],$$

und

$$\mathfrak{T}_i^k = \Theta_i^k + \partial_r \mathfrak{B}_{..i}^{rk} + \frac{\partial \Omega}{\partial u_\alpha} K_{\alpha i}^{\beta k} u_\beta.$$

Wenn man zur euklidischen Metrik übergeht, nehmen diese zwei Gleichungen folgende Form an:

$$\partial_k T_{ik} = \frac{\partial L}{\partial u_\alpha} \dot{u}_{\alpha i} + \partial_k \left(\frac{\partial L}{\partial u_\alpha} K_{\alpha i}^{\beta k} u_\beta \right), \quad (78)$$

$$T_{ik} = \Theta_{ik} + \partial_r B_{rki} + \frac{\partial L}{\partial u_\alpha} K_{\alpha i}^{\beta k} u_\beta. \quad (79)$$

Die Gleichung (78) besagt, dass der Energie-Impuls-Tensor nicht divergenzfrei ist, die Energie und der Impuls des Feldes nicht konstant sind. Das bedeutet, dass das Feld mit seiner Umgebung Energie und Impuls austauscht. Die Gleichung (79) gibt an, wie man den symmetrischen Energie-Impuls-Tensor zu konstruieren hat. Ein neues Glied kommt vor, dessen Bestimmung die Kenntnis des *allgemein-kovarianten* Transformationscharakters von u_α voraussetzt. Die kovariante Form der Lagrange-Funktion braucht man auch jetzt nicht.

Die Momenten-Dichte des Feldes ist gemäss (8)

$$M_{ikr} = x_i \Theta_{kr} - x_k \Theta_{ir} + Q_{ikr} + S_{ikr} + \frac{\partial L}{\partial u_\alpha} (x_i K_{\alpha k}^{\beta r} - x_k K_{\alpha i}^{\beta r}) u_\beta + \\ + \partial_s (x_i B_{srk} - x_k B_{sri}),$$

und der Gesamt-Drehimpuls

$$\mathbf{M}_1 = \frac{1}{ic} \int x_2 \Theta_{34} - x_3 \Theta_{24} + Q_{234} + S_{234} dV + \\ + \frac{1}{ic} \int \frac{\partial L}{\partial u_\alpha} (x_2 K_{\alpha 3}^{\beta 4} - x_3 K_{\alpha 2}^{\beta 4}) u_\beta dV.$$

Man sieht, dass ein neues Glied auftritt, das von der Wechselwirkung mit der Umgebung stammt und von dem man nicht wissen kann, ob es zum Bahn-Moment oder zum Spin zu rechnen ist. In solchen, in sich selbst nicht konservativen Feldern gehen also viele schöne Resultate verloren. Man kann diese Schwierigkeiten umgehen, wenn man zur Lagrange-Funktion des Feldes auch die Lagrange-Funktion seiner »Umgebung« (zum Beispiel die der feldtragenden Materie) addiert.

*

Herrn Professor K. F. Novobátzky danke ich für sein Interesse und mehrere wertvolle Anweisungen. Herrn Dr. G. Szamosi bin ich für die Anregung zu dieser Arbeit ebenfalls zu Dank verpflichtet.

LITERATUR

1. H. Weyl : Gruppentheorie und Quantenmechanik 1928, 157.
2. B. L. van der Waerden : Die gruppentheor. Methode in der Quantenmech. 1932, 62.
3. D. Hilbert, Göttinger Nachrichten 1915, 395.
4. L. Rosenfeld, Mem. de l'Acad. roy. de Belgique 8. No. 6, 1940.
5. F. Belinfante, Physica, 6, 887, 1939.
6. F. Belinfante, Physica, 7, 449, 1940.
7. W. Pauli, Rev. Mod. Phys. 13, 205, 1941.
8. J. S. de Wet, Proc. Camb. Phil. Soc. 43, 511, 1947.
9. T. S. Chang, Proc. Camb. Phil. Soc. 44, 76, 1948.
10. W. Pauli, Encykl. der Math. Wiss. V. 616.
11. J. S. de Wet, Proc. Camb. Phil. Soc. 44, 526, 1948.
12. G. Szamosi, Hungarica Acta Physica 1. No. 6, 1950.
13. P. Weiss, Proc. Roy. Soc. A. 169, 102, 1938.
14. G. Wentzel : Einf. in die Quantentheorie der Wellenfelder 1943, 82, 118, 172.
15. K. F. Novobátzky, Hungarica Acta Physica 1. No. 5, 1949.
16. G. U. Schubert, Annalen der Physik VI. 6, 163, 1949.

ИМПУЛЬСВРАЩЕНИЯ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЕЙ

Д. Маркс

Резюме

Метод Белинфанте, который служит для создания симметричного тензора энергия-импульсов, обобщается на поля, описанные уравнениями поля высшего класса. Полный импульсвращения, выраженный каноническими переменными и образованный из симметрических тензоров энергия-импульсов является количеством независимым от уравнений полей, определенных однозначно через характеристику трансформации Лоренца потенциала поля. Точка массы аналогично импульсвращения может быть однозначно разбита на спин и на импульсвращения орбиты.

ON THE MAGNETIC EFFECTS OF TURBULENCE IN IONIZED GASES

By

I. K. CSADA

KONKOLY OBSERVATORY, BUDAPEST

(Presented by K. Novobátzky. — Received 25. IV. 1951.)

In gases which are good electric conductors (ionized gases) local magnetic fields can rise spontaneously by turbulence. These fields may be produced by the diffusion of electrons due to fluctuating temperature. *Batchelor's* stability criteria show that highly ionized gases are instable to magnetic disturbances at temperatures above $10\,000^{\circ}\text{C}$. Based on the analogy between vorticity and magnetic field we may estimate the effects produced in perfect conducting gases, by making use of the vorticity transport hypothesis. We may infer that the specific conductivity of the gas decreases by some orders of magnitude and the magnetic permeability increases. This agrees with the investigations of *Sweet*, who has similarly come to this conclusion. A necessary condition is given by this theory for the origin of the permanent magnetic field of the stars derived from the high ionization and turbulence.

By introducing new functions the equations of the electromagnetic hydrodynamics may be written in symmetrical form analogous to the equations of motions in the classical hydrodynamics. The equations also remain analogous in the case of homogeneous isotropic turbulence.

Introduction

The spectra of many stars show particularly high turbulence in their atmosphere[1]. To explain the physical state of such stars the results of the turbulence theory — obtained in the laboratory — could not be applied directly. Namely the gases in the interior of the stars as well as in their atmosphere are very highly ionized and therefore perfect conductors. The different charges, electrons and ions, are easily displacing each other and thus local magnetic fields can rise instantaneously.

In the presence of external fields the generating of such fields is evident. The external magnetic field exerts forces upon the electrons and ions in a different way, hence the original neutral distribution may undergo a change.

The temperature of a gas in thermodynamical instability may essentially differ in some points from that of the surroundings. But simultaneously with the temperature the rate of ionization changes as well, resulting in the diffusion of electrons in order to equalise the density difference of the free electrons. Therefore, the number of electrons would surpass that of the ions at places of lower temperature, preventing thereby a further diffusion. Lack or preva-

lence of the electrons would generate local electric fields and in the case of mechanical motions (i. e. eddy motions) magnetic fields as well.

Hence, the condition for producing local magnetic fields instantaneously is given in the thermodynamical and mechanical instability of the gas. The increase or decrease of such an electromagnetic field depends upon the relation between the diffusion of the mechanic and magnetic energy. *Batchelor* examined the stability of the conductive liquids to instantaneous magnetic disturbances. The condition of stability of a liquid in turbulence according to him is as follows :

$$\begin{array}{ll} \varepsilon < \frac{c^2}{4\pi\mu\sigma} & \text{stable} \\ \varepsilon > \frac{c^2}{4\pi\mu\sigma} & \text{indifferent} \\ & \text{instable} \end{array} \quad (1)$$

where ε/ρ is the kinematic viscosity, μ the magnetic permeability, σ the specific conductivity (in E. S. U.). In stability the energy of the disturbance will diminish and after a certain time the field disappears. Again in the case of instability the energy would increase exponentially at the beginning. (The increase of the energy may be attributed to the influence of *Alfvén's* magnetic depression. With the appearance of a disturbing field, the pressure, temperature and rate of ionization diminish, intensifying thereby the diffusion of electrons as well as the electromagnetic field itself.) A limit for the intensifying of a disturbing field is set up by the equilibrium between mechanical and thermodynamical effects on the one hand and the electromagnetic field originated by the shift of the charges, on the other hand.

According to the above stability criteria the Sun's photosphere is stable to magnetic disturbances. The kinematic viscosity coefficient on the solar surface is about 10^{-8} . The magnetic permeability slightly differs from the unit, while the specific conductivity is of the order 10^{-12} , that is, the damping of the magnetic energy will be greater than 10^{-7} .

In considering stars showing instability we find, of course, a completely different situation. Under a constant density the kinematic viscosity coefficient increases with the temperature, while the right-hand side of (1) decreases with it. The viscosity and density of stars of type B and A hardly differ from those of the Sun but their temperature is essentially higher. According to the above statement there must be instability in these stars. The spectra of many stars belonging to these types show the presence of a strong magnetic field, the reason of which may be found in the instability[2].

It is another question, of course, how the turbulence will be influenced by a disturbing magnetic field (to which it shows instability). It would be difficult to answer this considering that we do not possess adequate experimental bases for it. Similarly, in accordance with the turbulence theory we may describe the motion there, so that the lines of force would be dissolved as the streamlines, that is to say, they would transform themselves into strongly

winding curves constantly altering in form. At a certain point the strength and direction of the magnetic field fluctuates constantly.

As shown by *Batchelor*, under certain acceptable neglects, there is an analogy, between vorticity and magnetic field. The equations governing the magnetic field-vector are identical in form with the equations governing the vorticity in an incompressible fluid in the absence of an electromagnetic field. We may derive the fluctuations of the magnetic field from the oscillations of the vorticity by this analogy.

We may refer to the oscillation of the vorticity from the mixing length hypothesis, although it has no physical reality, it can be employed to develop the turbulent viscosity in homogeneous isotropic turbulence.

Hence :

$$\text{rot } \mathbf{v}' = - (l, \text{grad}) \text{rot } \bar{\mathbf{v}} \quad (2)$$

where \mathbf{v} is the turbulent velocity, $\bar{\mathbf{v}}$ is the mean value of velocity, and l the mixing length. If we accept this hypothesis as a rough approximation of the turbulent velocity, we get for the fluctuation of the magnetic field, by the analogy between vorticity and magnetic field, the formula :

$$\mathfrak{H}' = - (l, \text{grad}) \bar{\mathfrak{H}} \quad (3)$$

where \mathfrak{H}' is the fluctuation of the magnetic field and $\bar{\mathfrak{H}}$ the mean value.

A more exact elaboration of this problem could be reached by introducing the spectral function [3]. The present paper should be considered as a preliminary one dealing with the effects observed in turbulent ionized gases. For a further elaboration we have to introduce the spectral function of the fluctuating magnetic field, and the correlations. In the following we shall start from the hydrodynamical equations and from the equations of the electro-magnetic field, and develop the equations for the magneto-hydrodynamics and for the disturbances of the magnetic field.

Fundamental equations

Let us begin with the equation of hydrodynamics completed with Lorentz's law of force and with Maxwell's equations for the electromagnetic field :

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \text{grad } V - \frac{e}{c} \mathfrak{E} - \frac{\mu}{c} [\mathbf{i}, \mathfrak{H}] - \frac{1}{\rho} \text{grad } p + \nu \Delta \mathbf{v} \quad (4)$$

$$\frac{d\varrho}{dt} + \varrho \text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (5)$$

$$c \text{rot } \mathfrak{H} = \varepsilon \frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial t} + \mathbf{i} \quad (6)$$

$$c \operatorname{rot} \mathfrak{E} = -\mu \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t} \quad (7)$$

$$\varepsilon \operatorname{div} \mathfrak{E} = \varrho_e \quad (8)$$

$$\operatorname{div} \mathfrak{H} = 0 \quad (9)$$

where \mathbf{v} is the velocity, V the gravitational potential, p the pressure, ϱ the density, \mathbf{i} the intensity of the electric currents, \mathfrak{E} the electric and \mathfrak{H} the magnetic strength, ε the dielectric constant, μ the magnetic permeability (assuming that ε and μ have the same values at all points), ϱ_e the charge density. Let us complete the above equations by adding Ohm's law for a conductive medium moving in a magnetic field:

$$\mathbf{i} = \sigma \mathfrak{E} + \frac{\sigma}{c} [\mathbf{v}, \mathfrak{H}], \quad (10)$$

where σ is the specific conductivity.

Equations of magneto-hydrodynamics

a) *Laminar motions.* From the equations (4)–(10) we may deduce the equations of the conservation of all momenta which may be understood as a more general form of the hydrodynamical equation of motion.

If ε and μ are constants we may write Lorentz's law of force with the aid of Maxwell's tensions in the form:

$$\begin{aligned} \varrho_e \mathfrak{E} + \frac{\mu}{c} [\mathbf{i}, \mathfrak{H}] = & -\operatorname{grad} \frac{1}{2} (\varepsilon \mathfrak{E}^2 + \mu \mathfrak{H}^2) + \\ & + \operatorname{Div} (\varepsilon \{\mathfrak{E}, \mathfrak{E}\} + \mu \{\mathfrak{H}, \mathfrak{H}\}) - \frac{\mu}{c} \frac{\partial [\mathfrak{E}, \mathfrak{H}]}{\partial t} \end{aligned} \quad (11)$$

where Div means tensor divergence and $\{\mathfrak{E}, \mathfrak{E}\}$, $\{\mathfrak{H}, \mathfrak{H}\}$ denote the following tensors¹:

$$\{\mathfrak{E}, \mathfrak{E}\}_{ik} = \mathfrak{E}_i \mathfrak{E}_k, \quad \{\mathfrak{H}, \mathfrak{H}\}_{ik} = \mathfrak{H}_i \mathfrak{H}_k.$$

Let us insert (11) in (4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\varrho \mathbf{v} + \frac{\varepsilon \mu}{c} [\mathfrak{E}, \mathfrak{H}] \right) + \operatorname{Div} (\{\varrho \mathbf{v}, \mathbf{v}\} - \varepsilon \{\mathfrak{E}, \mathfrak{E}\} - \mu \{\mathfrak{H}, \mathfrak{H}\}) = \\ = \varrho \operatorname{grad} V - \operatorname{grad} \left(p + \frac{1}{2} (\varepsilon \mathfrak{E}^2 + \mu \mathfrak{H}^2) \right) + \nu \varrho \Delta \mathbf{v} \end{aligned}$$

where

$$\{\varrho \mathbf{v}, \mathbf{v}\}_{ik} = \varrho v_i v_k.$$

¹ More generally the tensorial product of \mathfrak{A} and \mathfrak{B} may be written;

$$\mathfrak{T} = \{\mathfrak{A}, \mathfrak{B}\} \quad \text{or} \quad T_{ik} = \mathfrak{A}_i \mathfrak{B}_k.$$

The so-called Poynting vector on the left-hand side $\frac{1}{c} [\mathfrak{E}, \mathfrak{H}]$ gives the momentum of the electromagnetic field, which, compared with the mechanical momentum, may generally be neglected (if the magnetic and electric fields are not too strong). In the second member of the right-hand side $\varepsilon \mathfrak{E}^2 + \mu \mathfrak{H}^2$ is the energy of the electromagnetic field which, being a correction of pressure, becomes more important in so far as the electromagnetic field fluctuates.

From Maxwell's equations and Ohm's law a very important equation concerning the magnetic field can be derived. Let us insert (10) into (6) and take the rotation (curl) of both sides:

$$-c \Delta \mathfrak{H} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} (\text{rot } \mathfrak{E}) + \sigma \text{rot } \mathfrak{E} + \frac{\sigma \mu}{c} \text{rot } [\mathfrak{v}, \mathfrak{H}].$$

Making use of (7):

$$c \Delta \mathfrak{H} = + \frac{\varepsilon \mu}{c} \frac{\partial^2 \mathfrak{H}}{\partial t^2} + \frac{\sigma \mu}{c} \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t} - \frac{\sigma \mu}{c} \text{rot } [\mathfrak{v}, \mathfrak{H}].$$

If the magnetic field has no high frequency oscillations, $\partial^2 \mathfrak{H} / \partial t^2$ may be neglected and we obtain:

$$\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t} - \text{rot } [\mathfrak{v}, \mathfrak{H}] = \frac{c^2}{\sigma \mu} \Delta \mathfrak{H} \quad (12)$$

or

$$\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t} + \text{Div } \{\mathfrak{H}, \mathfrak{v}\} - \text{Div } \{\mathfrak{v}, \mathfrak{H}\} = \kappa \Delta \mathfrak{H} \quad (12 a)$$

where $\kappa = c^2 / \sigma \mu$.

Batchelor has shown that this equation is analogous to the equation governing the vorticity [4].

We may neglect the terms containing the electric field-vector in equation (10) and so we obtain as the two fundamental equations of the magneto-hydrodynamics:

$$\frac{\partial \varrho \mathfrak{v}}{\partial t} + \text{Div } \{\varrho \mathfrak{v}, \mathfrak{v}\} - \text{Div } \{\mu \mathfrak{H}, \mathfrak{H}\} = \varrho \text{grad } V - \text{grad } P + \nu \varrho \Delta \mathfrak{v} \quad (13)$$

$$\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t} + \text{Div } \{\mathfrak{H}, \mathfrak{v}\} - \text{Div } \{\mathfrak{v}, \mathfrak{H}\} = \kappa \Delta \mathfrak{H} \quad (14)$$

where

$$P = p + \frac{1}{2} (\varepsilon \mathfrak{E}^2 + \mu \mathfrak{H}^2).$$

We may write both equations in a more symmetrical form, by introducing new functions. Let us multiply (13) by $1/\varrho$ and (14) by $(\mu/\varrho)^{1/2}$ and add them together

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(v + \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \mathfrak{F} \right) + \\ & + \text{Div} \left\{ \{v, v\} - \frac{\mu}{\varrho} \{ \mathfrak{F}, \mathfrak{F} \} + \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \{ \mathfrak{F}, v \} - \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \{ v, \mathfrak{F} \} \right\} = \\ & = \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P + \Delta \left(v + \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \mathfrak{F} \right). \end{aligned}$$

If ϱ is constant we have:

$$\frac{\partial \mathfrak{I}}{\partial t} + \text{Div} \{ \mathfrak{I}, \mathfrak{I}^* \} = \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P + \Delta \left(v + \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \mathfrak{F} \right) \quad (15)$$

where

$$\mathfrak{I} = v + \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \mathfrak{F} \quad (16)$$

$$\mathfrak{I}^* = v - \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \mathfrak{F}. \quad (17)$$

We obtain a similar equation by subtracting (14) from (13), only \mathfrak{I} and \mathfrak{I}^* must be interchanged:

$$\frac{\partial \mathfrak{I}^*}{\partial t} + \text{Div} \{ \mathfrak{I}^*, \mathfrak{I} \} = \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P + \Delta \left(v - \left(\frac{\mu}{\varrho} \right)^{1/2} \mathfrak{F} \right). \quad (18)$$

We may also derive this equation from (17) by interchanging \mathfrak{I} and \mathfrak{I}^* .

According to *Batchelor* in the case of indifferent equilibrium of the hydrodynamical and electrodynamical procedures ν is equal to κ , and then we may write for (17) and (18):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathfrak{I}}{\partial t} + \text{Div} \{ \mathfrak{I}, \mathfrak{I}^* \} &= \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P + \nu \Delta \mathfrak{I} \\ \frac{\partial \mathfrak{I}^*}{\partial t} + \text{Div} \{ \mathfrak{I}^*, \mathfrak{I} \} &= \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P + \nu \Delta \mathfrak{I}^*. \end{aligned} \quad (19)$$

The solutions of these equations seem to be easier than those of (13) and (14). But the solutions of (19) according to the equation of hydrodynamical continuity (9) have to fulfill certain conditions which may be written in the following form:

$$\begin{aligned} \text{div } \mathfrak{I} &= 0 \\ \text{div } \mathfrak{I}^* &= 0. \end{aligned} \quad (20)$$

b) Turbulent motion. Based on the hypothesis mentioned in the introduction we may easily pass from the equations of the laminar motion, over

to those of the turbulent state. Let us assume that besides the oscillation of velocity, of pressure, etc. the turbulence would be characterized by the fluctuation of the magnetic field. However, in the absence of an external magnetic field the mean value does not necessarily differ from zero. But if the disturbing fields are slightly adjusted (having approximately the same directions) the mean value will not equal zero. In the following we assume that the mean value of the fluctuating field is not zero.

Let us take \bar{v} and $\bar{\mathfrak{H}}$ for the mean values of the velocity and of the magnetic field-vector, their turbulent perturbations should be denoted by v' and \mathfrak{H}' we may write:

$$v = \bar{v} + v' \quad \mathfrak{H} = \bar{\mathfrak{H}} + \mathfrak{H}'.$$

Inserting these expression into (12)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\mathfrak{H}}}{\partial t} + \frac{\partial \mathfrak{H}'}{\partial t} - \text{rot} [\bar{v}, \bar{\mathfrak{H}}] - \text{rot} [v, \mathfrak{H}'] - \text{rot} [v', \bar{\mathfrak{H}}] - \text{rot} [v', \mathfrak{H}'] = \\ = \kappa \Delta \bar{\mathfrak{H}} + \kappa \Delta \mathfrak{H}'. \end{aligned}$$

We take mean values (supposing that $\bar{v}' = 0$ and $\bar{\mathfrak{H}}' = 0$):

$$\frac{\partial \bar{\mathfrak{H}}}{\partial t} - \text{rot} [\bar{v}, \bar{\mathfrak{H}}] = \kappa \Delta \bar{\mathfrak{H}} + \text{rot} [v', \bar{\mathfrak{H}}]. \quad (21)$$

Inserting (3) into the last member of the right-hand side:

$$[v', \bar{\mathfrak{H}}] = -[v', (l, \text{grad}) \bar{\mathfrak{H}}] = A_{ik} \frac{\partial \bar{\mathfrak{H}}_i}{\partial x_k} - A_{ik} \frac{\partial \bar{\mathfrak{H}}_k}{\partial x_i}$$

where A_{ik} denotes the following tensor:

$$A_{ik} = \bar{v}_i \bar{l}_k \quad (22)$$

which formally corresponds to the exchange-tensor of the turbulent motion. Assuming again that, in the case of isotropic turbulence only the diagonal terms of A_{ik} are not equal to zero, that is

$$A_{ik} = \begin{cases} A, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} \quad A = |\bar{v}'| |\bar{l}|$$

then the equation becomes essentially simplified:

$$[v', \bar{\mathfrak{H}}] = -A \text{rot} \bar{\mathfrak{H}}.$$

Inserting it into (21) if A is constant:

$$\frac{\partial \bar{\mathfrak{H}}}{\partial t} - \text{rot} [v, \bar{\mathfrak{H}}] = (\kappa + A) \Delta \bar{\mathfrak{H}}.$$

The role of Λ is, therefore, analogous to that of κ . Its expression resembles that of the turbulent viscosity coefficient. If we assume that l is identical with the mixing length, then Λ will be identical with the coefficient of the turbulent viscosity. In this case besides Λ we may also neglect κ which is of the same order of magnitude as the molecular viscosity. The equation (22) would correspond to the condition of equilibrium in (1). The mean distance of velocity-disturbances (eddies) would correspond to that of the disturbances of the magnetic field (dipoles); this may be understood as the coincidence of the eddies and of the disturbing magnetic field. As mentioned in the introduction the development of such a system could only be explained if the temperature in the centre of an eddy were lower than that of its neighbourhood.

The turbulent conductivity and magnetic permeability

As I have mentioned, the mean value of the magnetic-disturbances will differ from zero, if they tend to arrange themselves. We may accept criterion (1) for the increase of this field. In this so called macroscopic field the macroscopic motion of the medium would correspond to the molecular phenomena. The turbulent viscosity corresponds to the molecular viscosity, the damping of the magnetic energy due to the turbulence corresponds to the Joule heat loss. We have expressed the diffusion of the magnetic field due to the molecular phenomena by means of the specific conductivity and the magnetic permeability. The question arises here as to whether the macroscopic damping in turbulence could not be solved by introducing similar quantities. Such supposed quantities would be the turbulent conductivity and the turbulent magnetic permeability.

After this we may write Λ in the following form:

$$\Lambda = \frac{c^2}{MS} \quad (23)$$

where M is the turbulent magnetic permeability and S the turbulent conductivity. If the former theory is correct, then Λ will be equal to the turbulent viscosity coefficient. The value of which, as is well known, may also be about 10^6 times higher than the corresponding molecular quantity. Consequently the product MS has to differ from $\mu\sigma$ by the same order. Based upon certain electromagnetic peculiarities of the turbulent elements I have referred earlier to such a change. (Supposing the turbulent elements to possess charges as well as magnetic momenta, further charge transports can be possible only by means of macroscopic motion of the turbulent elements. The electrons only diffuse towards the turbulent elements and their motions towards the external field may be neglected.) But I did not succeed in an exact elaboration.

In the meantime appeared Sweet's paper [5] dealing with a similar problem. It was shown by him that conductivity is diminished by several orders of magni-

due to the rapid fluctuation of the turbulent motion and magnetic field. According to his approximation the specific conductivity in the convective layer of the Sun is diminished by at least 10^6 as a result of turbulence. Therefore, if conductivity was originally 10^{12} it would diminish to 10^6 in turbulence.

This value, although only a rough estimate, suited my investigations. If we take the electric charges of the sunspots equal to 10 coulombs, as necessary to build up their magnetic fields, we obtain a change of the same order of magnitude in accordance with the former inexact theory.

If conductivity based on (23) is known we may calculate the changed value of the magnetic permeability as well. According to (23):

$$MS = \frac{c^2}{A/\varrho} = 10^8$$

(A/ϱ being the turbulent viscosity coefficient) from which taking for the value of the conductivity 10^6 we get:

$$M = 1 + 10^2 \sim 10^2.$$

This result, though it still needs proving, appears to be remarkable from two points of view. Permeability being higher than the unit, it is independent of the motion of the medium (ions). Namely if the magnetic field is built up by the motion of the ions simultaneously with the magnetic momenta then momenta of momentum would occur, lending to the field thereby a diamagnetic peculiarity [6]. On the other hand, only ferromagnetic media possess such a high permeability as is well known, where in the case of specially arranged elementary magnetic dipoles, a permanent external field built up. Such an arrangement is not at all trivial in turbulence, but the mean value of the disturbing field would differ from zero only then when the fields within a suitable large volume element do not destroy each other. In the following we have assumed the presence of such a special arrangement, but the correctness of this assumption has not been proved. Perhaps we may hope to prove it by means of a more exact elaboration of the turbulence theory. For the moment the correctness of this hypothesis could most probably be examined by means of experiments. Unfortunately it would be very difficult to compile such an experiment because the turbulence of gases of very high temperature must be examined. These highly ionized gases show an excessive tendency to chemical reaction in consequence of their high temperature (some thousand degrees) and could therefore attack the substance of the equipment producing the stream.

Thus in the following we have to accept the arrangement of the magnetic disturbances as the most important hypothesis of the present theory.

Accepting this hypothesis it would be conceivable at once that the magnetic field of the stars results from high ionization and turbulence. In any case this inference is not inconsistent with the observations as the strongest magnetic

fields have been measured in stars of types B and A which showed also the highest Doppler shift resulting from the turbulence. The magnetic field of the Sun and its turbulent state compared to those of the above stars is small in accordance with the hypothesis. The magnetic field of the Earth may also be similar. We may infer the turbulence from the very high viscosity of the interior of the Earth[7].

Based on this hypothesis, we may also draw conclusions directly, as to the above high value of magnetic permeability. The energy of an external field, as is well known, will be changed by the permeability of the medium, if we take \mathfrak{H}^2 for the energy per unit volume in vacuo, then in a medium with permeability μ it will change to $\mu \mathfrak{H}^2$. Therefore the energy of the field will increase, if the permeability is higher than the unit, and it will decrease if lower. Similarly permeability may also be understood in the turbulence. If the energy of the magnetic field increases after turbulence has come into operation, the medium will show paramagnetic peculiarities, and diamagnetic ones if the energy decreases.

Let us assume that the permeability of a gas in absence of turbulence is equal to the unit. The strength of the field in turbulence would be constantly fluctuating in consequence of the magnetic disturbances. Therefore we may write :

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_0 + \mathfrak{H}'$$

where \mathfrak{H}_0 is the mean value composed of the external field and the mean strength of disturbances. The energy of the field will be :

$$\mathfrak{H}^2 = \mathfrak{H}_0^2 + 2 \mathfrak{H}_0 \mathfrak{H}' + \mathfrak{H}'^2.$$

Let us assume that $\mathfrak{H}' = 0$. If we consider \mathfrak{H} as a vector of magnetic induction we may write :

$$\mathfrak{H} = M \mathfrak{H}_0$$

from which :

$$M = 1 + \left(\frac{\mathfrak{H}'}{\mathfrak{H}_0} \right)^2.$$

The mean value of the disturbances being essentially lower than the external field, \mathfrak{H}^2 contains only the energy of the external field. It follows from the above formula that M will always be larger than the unit, proving that the turbulent state becomes paramagnetic.

Considering the phenomena of the solar surface it seems to be probable that sunspots produce the magnetic field of the Sun for an external field so

$$\mathfrak{H}'/\mathfrak{H}_0 \sim 10$$

from which

$$M = 1 + 10^2 \sim 10^2$$

which agrees with the foregoing calculations referring to order of magnitude

Magneto-hydrodynamic equations in turbulence

We have examined above the quantitative changes of the conductivity and permeability in turbulence. Let us develop in the following, and change the fundamental equation (19) by using the hypothesis (2) and (3). In order to amplify the calculations we take instead (2) the formula

$$\mathbf{v}' = -(\mathbf{l}, \text{grad}) \bar{\mathbf{v}}, \quad (25)$$

which in case of isotropic homogeneous turbulence would also be correct.

The equations concerning the mean values will be:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\mathfrak{I}}}{\partial t} - \text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}, \bar{\mathfrak{I}}^* \} &= \text{grad } V = \frac{1}{\varrho} \text{grad } P - \text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}, \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \} \\ \frac{\partial \bar{\mathfrak{I}}^*}{\partial t} + \text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}^*, \bar{\mathfrak{I}} \} &= \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P - \text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}^*, \bar{\mathfrak{I}} \} \end{aligned} \quad (26)$$

taking the molecular viscosity zero and conductivity infinite). Making use of the equation (3) and (25) standing for $\bar{\mathfrak{I}}$ and $\bar{\mathfrak{I}}^*$:

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{I}} &= -(\mathbf{l}, \text{grad}) \bar{\mathfrak{I}} \\ \bar{\mathfrak{I}}^* &= -(\mathbf{l}, \text{grad}) \bar{\mathfrak{I}}^*. \end{aligned}$$

Utilising these formulae $\{ \bar{\mathfrak{I}}', \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \}$ may be transformed as follows¹:

$$\{ \bar{\mathfrak{I}}', \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \} = -\{ (\mathbf{l}, \text{grad}) \bar{\mathfrak{I}}, \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \} = -\{ \text{grad}, \bar{\mathfrak{I}} \} \cdot \{ \bar{\mathfrak{I}}^{*'}, \mathbf{l} \}.$$

Or denoting it in a tensorial form

$$\{ \bar{\mathfrak{I}}^{*'}, \mathbf{l} \}_{ik} = \bar{\mathfrak{I}}_i \mathbf{l}_k \quad \text{and} \quad \{ \text{grad}, \bar{\mathfrak{I}} \}_{ik} = \frac{\partial \bar{\mathfrak{I}}_k}{\partial x_i}$$

so

$$\text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}', \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \} = \frac{\partial \{ \bar{\mathfrak{I}}', \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \}_{ik}}{\partial x_k} = -\frac{\partial \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \mathbf{l}_j}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial \bar{\mathfrak{I}}_i}{\partial x_j} - \bar{\mathfrak{I}}_k' \mathbf{l}_j \frac{\partial^2 \bar{\mathfrak{I}}_i}{\partial x_j \partial x_k}.$$

Inserting it into (26) we obtain the equation for magneto-hydrodynamics in turbulent motion:

$$\frac{\partial \bar{\mathfrak{I}}}{\partial t} + \text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}, \bar{\mathfrak{I}}^* \} = \text{grad } V - \frac{1}{\varrho} \text{grad } P + A^* \Delta \bar{\mathfrak{I}}. \quad (28)$$

In the case of homogenous isotropic turbulence only the diagonal elements of the tensor $\{ \bar{\mathfrak{I}}^{*'}, \mathbf{l} \}$ are not zero and these will also be constant, that is

$$\bar{\mathfrak{I}}_i' \mathbf{l}_k = \begin{cases} A^* & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases}$$

and so

$$\text{Div} \{ \bar{\mathfrak{I}}', \bar{\mathfrak{I}}^{*'} \} = -A^* \Delta \bar{\mathfrak{I}}. \quad (27)$$

¹ The dot here signifies the tensorial (transformation) product of two tensors.

$$-\frac{\partial \mathfrak{I}^*}{\partial t} + \text{Div} \{ \mathfrak{I}^*, \mathfrak{I} \} = \text{grad } V - \frac{1}{\rho} \text{grad } P + A \Delta \mathfrak{I}^* \quad (29)$$

where

$$A = |\mathfrak{I}'| |\mathfrak{I}| = |\mathfrak{v}'| |\mathfrak{I}| + \left(\frac{\mu}{\rho} \right)^{1/2} |\mathfrak{S}'| |\mathfrak{I}|$$

$$A^* = |\mathfrak{I}^{*'}| |\mathfrak{I}| = |\mathfrak{v}'| |\mathfrak{I}| - \left(\frac{\mu}{\rho} \right)^{1/2} |\mathfrak{S}'| |\mathfrak{I}|.$$

The equations under (20) remain unaltered.

The solution of equations (28) and (29) for a rotating star seem to be very difficult. We have to calculate the gravitational potential from Poisson's equation and the pressure from the equation of state. Hereafter there are still six unknowns, the components of \mathfrak{I} and \mathfrak{I}^* . We may eliminate three of them by transforming the system into a system of fourth order. One of the systems of the unknowns is contained linearly in (28) the other in (29). We may calculate them simply algebraically and inserting the results into the other system of equations, we obtain a system of differential equations of the fourth order.

REFERENCES

1. A. Unsöld, O. Struve, *Astrophysical Journal*, **110**, 455, 1949.
2. H. W. Babcock, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, **59**, 112, 1947.
3. A. N. Kolmogoroff, *C. R. Acad. Sci. U. R. S. S.*, **30**, 301 and **32**, 16.
4. G. K. Batchelor, *Proc. Roy. Soc. London, A*, **201**, 405, 1950.
5. P. A. Sweet, *Monthly Notices of Roy. Soc.*, **110**, 69, 1950.
6. G. Joos, *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Leipzig 1932. p. 388.
7. S. K. Runcorn, *Nature*, **166**, 974, 1950.

МАГНИТНЫЙ ЭФФЕКТ ТУРБУЛЕНТНОГО СОСТОЯНИЯ В ИОНИЗИРОВАННЫХ ГАЗАХ

И. К. Чада

Резюме

В газах с хорошей электропроводностью (ионизированных) вследствие турбулентного состояния возникают мгновенные локальные магнитные поля. Эти поля вызываются диффузией электронов, возникающей вследствие колебания температуры. Из критерия стабильности Бечелора можно определить, что легкоионизирующиеся газы при температуре около 10.000°C являются нестабильными по отношению к магнитным помехам. На основе аналогии интенсивности турбулентности и напряженности магнитного поля с помощью теории вихревого транспорта можем оценить те эффекты, которые возникают в газе, обладающем хорошими проводящими свойствами. Можем сделать вывод, что удельная проводимость газа должна падать с некоторыми порядками в то время когда магнитная проницаемость должна возрастать. Теория дает необходимое условие того, что магнитное поле звезд происходит от ионизации и от турбулентного состояния.

Уравнения электромагнитной гидродинамики с введением новых функций могут быть записаны в симметричной форме, что является аналогичным уравнениям движения классической гидродинамики. Уравнения остаются аналогичными в случае гомогенной изотопной турбулентности.

INVESTIGATIONS CONCERNING LIGHT SOURCES FOR SPECTRUM ANALYSIS I

INTERRUPTED ARC SOURCE FOR SPECTRUM ANALYSIS

By

A. BARDÓCZ

HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES, CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS
DEPARTMENT FOR SPECTROSCOPY

(Presented by I. Kovács. — Received 26. IV. 1951.)

By way of introduction, the paper describes the fundamental principles of interrupted arc sources, and classing them into four groups, gives a general survey of the types of apparatus constructed up to now. In continuation it describes in detail the practical construction of, and the results obtained by means of an interrupted arc source of such a kind, that only the basic principle was known on the basis of patent specifications. The substantial feature of this interrupted arc source consists in the provision of a high-voltage ignition circuit which contains no other high-voltage element except a Tesla transformer. The production of the igniting voltage is effected by means of a low-voltage controlled circuit. The possibilities for adjustment of the equipment for different operating conditions is greater than that of existing types of apparatus, whilst its reproducibility is equal to the reproducibility of the best types of apparatus known up to date.

Introduction

The investigations described below were based on the task of establishing, by means of experiments, an excitation apparatus suitable for the purposes of qualitative and semi-quantitative spectrum analysis, mainly in the visible spectrum region and differing from the arrangements employed up to now, being as simple as possible, whilst satisfying up-to-date requirements.

These requirements included good reproducibility, reliability, small volume in order to enable the apparatus to be easily moved, and, at the same time, it was essential that the cost should be in proportion to the price of the spectral apparatus employed.

It was necessary to choose between three kinds of spectroscopic sources of light, viz. the direct-current arc, the high-voltage spark, and the alternating-current interrupted arc. As to the application of direct current, this had to be ruled out, owing to its well-known drawbacks. Moreover, the production of direct current for the purpose of spectrum analysis in places where it is not available with the desired relatively high output capacity is very expensive, and, in addition thereto, it is fixed to a certain spot, and where it is not available, the apparatus for spectrum analysis adjusted for this source of light cannot be used.

The high-voltage electric spark, in general, does not possess sufficient light intensity for visual spectroscopic investigations, it is also rather bulky, and it is the most expensive of all types of excitation apparatus.

Under these circumstances it was the alternating-current interrupted arc with high-frequency ignition that appeared the most suitable for the purpose indicated.

After the introduction by *Pfeilsticker* [11] into spectrum analysis of the interrupted arc ignited by means of high-frequency currents, this excitation apparatus has become widespread, and is at present being employed in highly different variants. An important extension of the self-igniting interrupted arc is the low-voltage spark which, likewise, was first mentioned by *Pfeilsticker* [15]. The arrangement concerned here is that of a condenser battery of high capacity being connected in parallel to the analysis arc gap, which is charged to a relatively low voltage. This charge is here also being initiated by means of high-frequency high-voltage currents.

According to how the high-frequency and high-voltage currents effecting the initial ignition of the low-voltage arc are produced, the interrupted arc sources or low-voltage spark sources may be classed roughly into four groups.

1. The high-frequency and high-voltage currents being generated in a system composed of a condenser, a self-inductance and a spark gap, following which the said currents are, with the aid of a Tesla transformer, transferred to the low-voltage discharge circuit. Similar excitation devices — which for the present still differ more or less from each other as regards their method of connection — have been described in addition to *Pfeilsticker* [11] also by *Sventickij* [12], [17], [18], [22], [31], [35], *Calker* [13], *Gerlach* and *Rollwagen* [14], *Hemmendinger* [23], *Saunderson* and *Caldecourt* [29], *Mika*, *Macher* and *Vorsatz* [42], *Török* [46], etc. In the case of these types of apparatus, in which the arc discharge may be fed either by direct or by alternating current, the ignition is produced without any rhythm-keeping member being inserted. In some cases this may result in that the arc discharges will not be regular. The ignition currents produced in this manner are, besides, being employed for the simple ignition of direct-current arcs too [24], [44].

2. The high-frequency and high-voltage ignitor current is produced in a controlled spark source thereby assuring the proper rhythm of ignition together with arc discharge. The description of similar types of apparatus may be found in the works of *Schmidt* [21], *Hasler* and *Dieter* [28], *Schmidt* and *Schuringa* [30], *Caldecourt* and *Saunderson* [32] [see also [33]], *Sinclair* [37], *Marti* [43]. In the case of these arrangements the high-frequency ignition currents are without exception being produced by means of an apparatus operated by a synchronous rotating switch, first described by *Feussner* [1], [2], [3], [4], [5], [6], [7], [8], [9], [10] [see also [17a], [25], [36], [38]]. Recently, the spark source controlled by a special controlling spark gap has been employed for the ignition

of low-voltage arcs or low-voltage sparks [27], [39]. These types of ignitor devices offer a possibility for adjusting their rhythm and the number of ignitions per unit of time, and, moreover, they also make a provision which enables the ignitor current not to pass through the arc gap during the intermission of the arc discharge, as such passage might possibly cause undesired air lines to be set up in the spectrum.

3. Among this group it is possible to class those kinds of low-voltage arc or spark sources, in which the generation of high-frequency currents and the control of ignition is effected by electronic means. The apparatus, first described by Findeisen [16], forms a transition between the types of apparatus described in 1. and the electronic types of apparatus. The generation of the high-frequency currents being effected in Findeisen's apparatus by electronic means, whilst the control of the arc itself is still being performed mechanically. The control is explicitly electronic in the types of apparatus described by Braudo and Clayton [34], Braudo, Craggs and Williams [40], (see also (41)), as well as in the type of apparatus described by Dwyer [45]. Among these types of excitation apparatus, the apparatus of Findeisen approximately possesses the properties of the types of apparatus described under 1., whilst the two last-named types of apparatus possess the properties of the types of apparatus described under 2.

4. According to the two German patents attributed to Kaiser [19] and Pfeilsticker [20], respectively, the high-frequency and high-voltage currents required for the ignition of the arc are being produced in a manner entirely different from that employed in the types of apparatus mentioned above. The substantial feature of the production of the high-frequency currents consists here in an electric condenser being charged to a low voltage (supply voltage), following which the condenser thus charged is discharged through a self-inductance forming the primary coil of a Tesla transformer. The voltage stepped-up in the Tesla transformer will then supply the ignitor currents. This arrangement is the most simple and the most inexpensive to construct of all the arrangements known up to date.

In addition to what has been said above, another obvious idea was to employ spark sources as used for the ignition of explosion engines, which supply a sufficiently good spark to justify the attempt to employ them for igniting the arc. Should this method of ignition yield satisfactory results, it would certainly mean a substantial simplification.

Preliminary investigations

According to the data of Bussien [26], it is possible, under ordinary circumstances, to produce, by means of magnetic and battery ignition devices, sparks of a length of 11 to 13 mm, which would be perfectly suitable for the ignition of low-voltage arcs serving the purposes of spectrum analysis. Moreover.

these igniting devices are being produced in great quantities at low cost and in reliable types, a circumstance that is not negligible from the practical point of view. We have indeed carried out the corresponding tests with magnetic, as well as with battery types of igniting apparatus. In the case of the magnetic igniting device, we arranged for the rotor of the magnet to be driven by means of a synchronous motor at a speed of 1500 R. P. M. The magnet, equipped with 24 igniting branches, of a 12-cylinder air-plane engine was connected to a pair of cylindrical electrodes of 5 mm diameter clamped in a spark stand, and powerful sparks of 10 to 12 mm length were obtained with a regularity corresponding to the number of revolutions per minute and to the branches of the magnet. We proceeded in a similar manner, in the case of the ignition devices of the

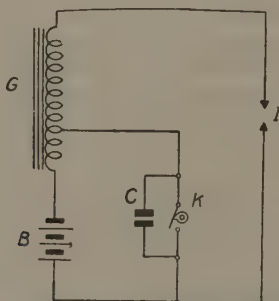


Fig. 1. Wiring diagram of the electric ignition apparatus of the battery type of an explosion motor. *B* storage battery, *C* condenser, *G* ignition coil, *I* spark gap, *K* rotary interrupter

battery type also, where the rotary interrupter (of the Bosch type) provided in the igniting apparatus of explosion engines was driven by means of the synchronous motor mentioned above. In this case the interrupter supplies four ignitions during each revolution of the synchronous motor, which, supposing a 50-cycle supply to be available, gives 6000 ignitions per minute, that is to say, there is one ignition in each half-period. As could be expected on the basis of the tests carried out with the igniting magnet, it was possible here also to produce, under the same conditions as before, powerful sparks of 10 to 12 mm length with the desired regularity. As in the case of these ignition devices, it was also possible to make provision for phase adjustment in a simple and advantageous manner, the possibility of employing the above ignition devices offered excellent prospects.

The preliminary tests already described were carried out by us according to the wiring diagram shown in Fig. 1, which illustrates the conditions for the battery type of ignition. The process for the production of the spark is as

follows: When closing the switch K , the low-voltage side of the ignitor coil G is connected to the storage battery B . The direct current starting in consequence thereof builds up a magnetic field in the coil, the magnetic energy of which field is a measure of the output of the ignitor coil. In order to obtain a sufficiently strong magnetic field, the coil G is equipped with an iron core. In addition to the primary coil, the iron core is also surrounded by the high-voltage coil side, the number of turns of which is substantially higher than the number of turns of the low-voltage coil side. After opening the switch K , the current becomes interrupted, the magnetic field will suddenly collapse, in consequence of which high-voltage is set up in the coil. The part played by the condenser C consists merely in promoting the extinction of the arc on the poles of the

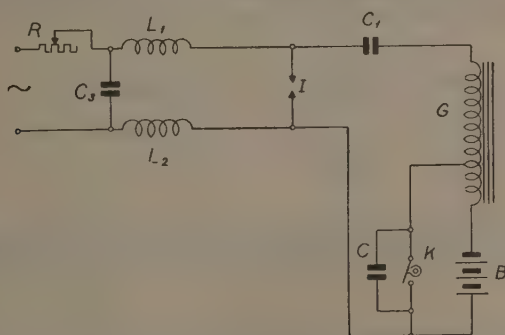


Fig. 2. Wiring diagram of interrupted-arc source. The part to the right of the spark gap I is the ignition circuit, the part to the left the arc circuit. R ohmic resistance, C , C_1 , C_3 condensers, L_1 — L_2 self-inductances, G ignitor coil, K rotary interrupter, B storage battery.

switch K . The switch K is controlled by a camshaft. The time required for the total building-up of the magnetic field amounts to about 0,01 seconds.

Practically one possibility offers itself for transferring the high-voltage igniting currents thus generated to the arc gap, and this is the one shown in Fig. 2, according to which the high-frequency and high-voltage currents are connected in a direct manner through the condenser C_1 to the arc gap I . In Fig. 2, the self-inductance coils L_1 and L_2 , as well as the condenser C_3 are filtering elements their purpose being to block the high-frequency currents from the supply mains. The resistance R serves for limiting the arc current.

In this case we find that no spark is formed by the arc gap and the arc does not ignite. The reason being that the high-voltage current impulses cannot be blocked from the supply mains by means of such filtering elements as can be constructed within practical limits, owing to the low frequency of the impulses, in consequence of which it is not through the

arc gap I , but in the supply mains that the discharge is closed. It is the above phenomenon that has prevented the employment of this highly promising ignitor device.

The production of an igniting voltage with the aid of a low-voltage controlled circuit

After the preliminary investigations described in the preceeding chapter, we have, for the reasons enumerated below, extended the tests to the equipment described under 4.

The types of apparatus described under 1., in addition to being expensive and containing a greater number of high-voltage constructional elements, are only partly and intricately controllable, whilst their repeatability will in many cases leave a great deal to be desired.

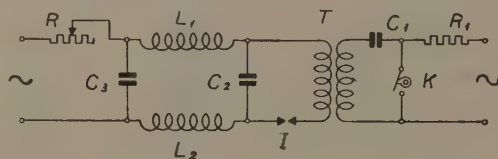


Fig. 3. The production of an igniting voltage with the aid of a low-voltage controlled circuit. T Tesla transformer, the part to the right of the latter being the ignition circuit, the part to the left the arc circuit, C_1, C_2, C_3 condensers, I arc gap, K rotary interrupter, R, R_1 ohmic resistances, L_1, L_2 self-inductances

The devices described under 2. yield discharges capable of good repetition, but they are bulky, and are the most expensive among the types of excitation apparatus of this kind.

The types of apparatus described under 3. have up to now hardly come into use, and therefore there is not a sufficient volume of data available regarding their cost and operating conditions.

Notwithstanding the great deal of literature available regarding interrupted-arc sources, we do not know a single work which discusses the igniting devices in question beside the two patents [19], [20] mentioned. The initial wiring diagram is shown in Fig. 3. The part situated to the right of the Tesla transformer is the igniting circuit, whilst the part on the left-hand side is the arc circuit. In the igniting circuit, R_1 denotes an ohmic resistance, C_1 a condenser and K a rotary interrupter, the latter being operated by a four-cam camshaft running at a synchronous speed of 1500 R. P. M. In Fig. 3 the part to the left of the condenser C_2 is the same as in Fig. 2. If the switch K is in the open position, the supply current passes through the connection elements R_1-C_1-T . When the switch K closes, which under ordinary circumstances happens when the voltage of the poles of the condenser C_1 is at its peak

value or in the vicinity of the latter, the condenser C_1 becomes discharged through the primary coil of the Tesla transformer T . This discharge will under the given circuit conditions be a high-frequency discharge. The currents circulating in the oscillatory circuit C_1 — K — T will induce high-frequency and high-voltage currents in the oscillatory circuit C_2 — I — T , which will cause the arc gap to ignite. In the present case we operated the igniting circuit with an effective voltage of 380 volts.

Information regarding the processes of low oscillation frequency taking place in the ignition circuit is supplied by the oscillograms of Fig. 5. These oscillograms have been taken with the aid of an oscillograph of the string type of Siemens make. In Fig. 5, the upper curve shows the conditions of the current flowing in the circuit, whilst the lower curve shows the voltage conditions at the poles of the condenser C_1 (Figs. 3 and 4). The switch K opens at the point

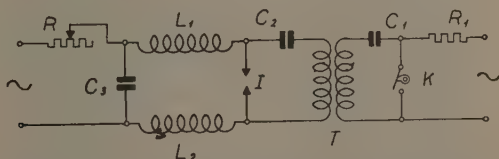


Fig. 4. Wiring diagram of interrupted-arc source. The part to the right of the arc gap I is the ignition circuit, the part to the left the arc circuit. R , R_1 ohmic resistances, C_1 , C_2 , C_3 condensers, L_1 , L_2 self-inductances, T Tesla transformer, K rotary interrupter.

At the point B of oscillogram, the voltage at the poles of the condenser C_1 increases up to the point B , corresponding to the peak value of the supply voltage. At the point B the switch K closes, and this is followed by the high-frequency discharge in the oscillatory circuit C_1 — K — T . The course of this high-frequency discharge is not shown by the oscillogram of Fig. 5. Switch K as employed here is the same as in Fig. 1, viz. a rotary interrupter of Bosch make. The voltage curve (lower curve) of Fig. 5 shows that these switches are closing during a time corresponding to 90 electric degrees, the time during which they are opening corresponding, likewise, to 90 electric degrees. As seen in Fig. 5, this closing and opening is regular. The opening and closing during relatively long periods enables the condenser C_1 to be charged or discharged, respectively.

The capacity of the condenser C_1 (Figs. 3 and 4) was determined by us experimentally at the figure at which the Tesla transformer T supplied the most suitable igniting discharges. The tests showed, that there exists a most advantageous figure at which the igniting spark operates with the best efficiency, this figure being 0,05 microfarad.

The function of the ohmic resistance R_1 (Figs. 3 and 4) is to limit the flow of current in the closed position of the switch K . As witnessed by the tests,

the value of R_1 is almost indifferent for the operation of the apparatus. In order to protect the contacts of the switch against unnecessary stress, its value has been chosen at the comparatively high figure of 400 ohms. Under these circumstances the intensity of the current passing in the switch K when closed is around 1 ampere. Taking into account the value, already indicated above as amounting to 0,05 microfarad, of the condenser C_1 , the current passing through the latter

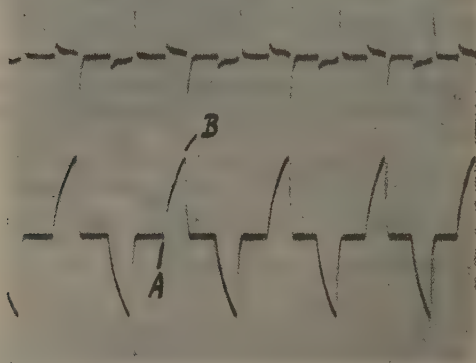


Fig. 5. Upper curve : course of current in the ignitor circuit of connection according to Figs. 3. and 4. Lower curve : course of the voltage at the poles of the condenser C_1 of the connections according to Figs. 3. and 4. At the point A the switch opens, at the point B the switch closes

in the open condition of the switch K amounts, at a voltage of 380 volts, to as little as $6 \cdot 10^{-3}$ amperes, thus causing only an insignificant amount of voltage drop during the passage of the said current through the resistance R_1 .

As witnessed by the tests, the Tesla transformer T has to satisfy the most exacting requirements as regards its type of construction. In view of the relatively small electrical energy available, satisfactory results can only be expected with elements presenting low losses. In the case of coils of the ordinary type of construction either no ignition spark will be obtained at all, or, even though such a spark is obtained, its energy will not be sufficient for igniting the arc gap. In order to reduce losses, the Tesla transformer T has been constructed according to the type shown in Fig. 6. The secondary coil is located on the six insulating ribs marked B , the latter being supported on the discs C made of insulating material likewise. The primary coil possessing a low number of turns is kept at a suitable distance from the secondary coil by the insulating ribs D .

As regards the step-up ratio of the Tesla transformer, the requirements are here, likewise entirely different from those necessary for the Tesla transformers employed in connection with the interrupted arc sources known up to date. Notably, in the types of apparatus employed till now, the voltage at the poles of the primary coil of the Tesla transformer is already almost as high as would be sufficient for striking the arc, and this voltage is, moreover, stepped-

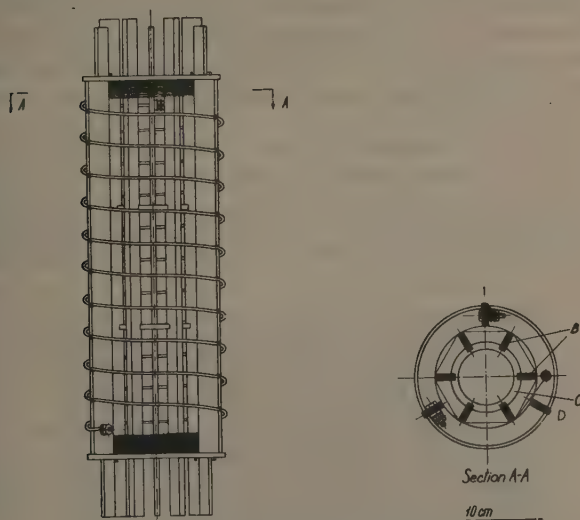


Fig. 6. Low-loss Tesla transformer

up subsequently to a multiple of its original figure. On the other hand, in our apparatus as described, it is the supply voltage that has to be stepped-up to 10—12 000 volts.

Two Tesla transformers were subjected by us to more thorough tests. Whilst the main dimensions and the general arrangement were identical, the primary coil possessed in both cases 10 turns of wire of 3 mm diameter. The secondary coil was made in the one case of wire of 1 mm diameter with 250 turns, in the other case of wire of 0,5 mm diameter with 540 turns. The largest spark gap distance, at which it was possible to maintain the spark discharge between flat ended cylindrical electrodes of 5 mm diameter amounted in the first case to 12, in the second case to 20 mm. It appeared that the condenser C_2 (Figs. 3—4) also possessed a most advantageous figure, which resulted here at 0,05 microfarad.

Another way, in which the ignition spark can be transferred to the arc circuit is by means of the connection represented in Fig. 4. In the connection according to Fig. 4, the arc circuit current does not pass through the secondary coil of the Tesla transformer T . In the case of this method of connection, ignition will be all the more perfect, the greater the self-inductance of the coils L_1 and L_2 . As, however, a practical limit has to be set to the self-inductance of these coils, their figure should be at least identical to the self-inductance of the secondary coil of the Tesla transformer.

The condensers C_1 and C_2 figuring in Figs. 3 and 4 are subjected to high stresses, and therefore, in order to reduce losses, it is essential that they should be of a low-loss type. For this purpose, the condensers possessing a mica dielectric are the most suitable.

The processes of the arc circuit

After having discussed the operating conditions of the ignition circuit, we shall now also describe the processes taking place in the arc circuit, although

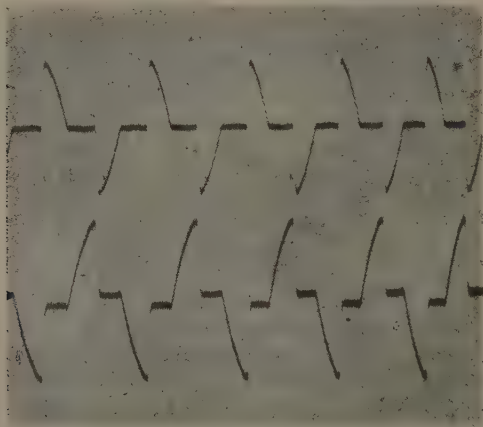


Fig. 7. Upper curve: course of the current in the arc circuit of the connections according to Figs. 3. and 4. Lower curve: course of the voltage along the arc gap I

this does not contain anything new. The conditions ruling here can be best characterised by the oscillograms of Fig. 7, where the upper curve shows the conditions of the current flowing in the arc circuit, whilst the lower curve shows the course of the voltage at the poles of the arc I at an effective feeding voltage of 380 volts. The oscillograms have here also been taken with the aid of an

oscillograph of the string type, and thus do not contain the high-frequency processes. As appears from the lower curve of Fig. 7, in the adjustment used here ignition was effected at the peak value of the supply voltage, in consequence whereof the voltage dropped to the arc voltage. Near the end of the supply voltage wave, the arc is extinguished, and then ignited again after the ignition occurring in the negative half-period. It is in accordance with the ignition and extinction, respectively, of the arc, that the current also varies in accordance with the upper curve of Fig. 7. The regularity and good repeatability of the discharge conditions also appear clearly in Fig 7.

Evaluation of the results

It is beyond doubt that the ignitor apparatus produced with the aid of the low-voltage controlled circuit here described is substantially simpler than any igniting apparatus known up to now. With the exception of the Tesla transformer, not a single high-voltage element is required for producing the igniting voltage, which fact is also important from the point of view of reducing danger to human lives. The reproduceability of the ignitions exceeds, in general, the reproduceability of the ignitions obtainable by means of the types of apparatus described under 1., and is identical with the reproduceability of the ignitions of the types of apparatus described under 2., it exceeds the adjustability of the latter, or, at least various adjustabilities can be achieved by substantially simpler means. Thus, for instance, by varying the phase position of the switch K according to Figs. 3 and 4, it is possible to ensure that the burning period of the arc should vary. It is true that by altering the adjustment of the phase of switch K , the efficiency of the ignition will diminish, as the charging voltage of the condenser C_1 (Figs. 3 and 4) contained in the ignition circuit will not attain its peak value. This, however, can be eliminated by inserting a phase-shifting circuit into the ignition circuit, by which the voltage of the ignition circuit is shifted in phase to the desired direction and extent in relation to the arc circuit and, thus the condenser C_1 is enabled to be charged at all times to the peak value of the mains voltage. The proportion between the burning period of the arc and the period of intermission can be varied still further by using the very simple trick of providing on the camshaft of the switch K figuring in the Figs. 3 and 4, let us say, three kinds of control-cams and, at the same time, three contacts arranged in such a manner as to ensure that ignitions should take place only during each second or only during each fourth half-period, respectively. By changing over the connections from one contact to the other, the desired operation conditions can be adjusted in a very simple manner. If, moreover, it is considered, that the peak voltage of the arc circuit is about 540 volts, so that to the right and to the left of the peak value of the A. C. main voltage there will still be available a sufficiently high voltage for

the ignition and maintenance of the arc, it will be possible to vary the proportion between the burning period of the arc and the period of intermission of the arc within very wide limits.

The results have shown that this interrupted-arc source which, as far as we know, has not been employed at all in practice up to now, will be of importance in spectrum analysis. Further tests relating to this subject are in course of progress, and an account of the results will be given later.

Acknowledgements

In carrying out the tests, I was greatly assisted by the scientific collaborators Bruno Vorsatz, Otto Scari and Zoltán Sibalszky, and by the instrument-maker collaborators József Gyűrű and József Bajcsi, for whose work I would express my thanks here. I would also express my thanks to colleague László Zelenka for the valuable advice given by him in connection with the construction of low-loss self-inductance coils.

REFERENCES

1. O. Feussner, Bemerkung zur Frage der optischen Spektralanalyse, *Zs. techn. Physik* **13**, 773, 1932.
2. O. Feussner, Zur Durchführung der technischen Spektralanalyse, *Arch. Eisenhüttenwes.* **6**, 551, 1932/33.
3. O. Feussner, Bemerkung zur Frage der quantitativen Spektralanalyse, *Zs. Metallkunde* **25**, 73, 1933.
4. O. Feussner, Ein neuer Funkenerzeuger für die Spektralanalyse, *Zeiss-Nachrichten* **4**, 6, 1933.
5. W. C. Heraeus and O. Feussner, Verfahren und Einrichtungen zur Funkenspektralanalyse, German patent No. 589 653, 1934.
6. W. C. Heraeus, Dispositif destiné à l'analyse spectrale, French patent No. 745 691, 1933.
7. W. C. Heraeus, Improvements in Apparatus for Producing electric Sparks for Use in Spectrum Analysis, British patent No. 400 607, 1934.
8. W. C. Heraeus and O. Feussner, Apparatus for Testing by Spectrum Analysis U. S. A. patent No. 1 971 215, 1934.
9. W. C. Heraeus, Einrichtung zur Funkenspektralanalyse, German patent No. 613 186 1935.
10. W. C. Heraeus and O. Feussner, Verfahren zur Funkenspektralanalyse, German patent No. 613 185, 1935.
11. K. Pfeilsticker, Der Abreissbogen mit Hochfrequenzzündung *Zs. Elektrochem.* **43** 719, 1937.
12. N. S., Sventickij Interruption Arc for Spectral Analysis (Russian), *Zavodskaya Lab.*, **6**, 325, 1937.
13. J. Calker, Über einige Erfahrungen bei spektralanalytischen Untersuchungen mit einem Abreissbogen begrenzter Bogenlänge, *Zs. anorg. allg. Chemie* **234**, 179, 1937.
14. W. Gerlach and W. Rollwagen, Fortschritte in der spektralanalytischen Methodik *Metallwirtschaft* **16**, 1083, 1937.
15. K. Pfeilsticker, Erfahrungen mit dem selbstzündenden Abreissbogen, *Zs. Metallkunde* **30**, 211, 1938.
16. O. Findeisen, Abreissbogen nach Pfeilsticker, *Zs. Metallkunde* **30**, 213, 1938.
17. N. S. Sventickij, Quantitative Spectrographic Analysis of Brass and Bronze (Russian) *Zavodskaya Lab.* **7**, 1371, 1938.

- 17/a. *H. Kaiser and A. Wallraff*, Über elektrische Funken und ihre Verwendung zur Anregung von Spektren, *Ann. Physik* **34**, 297, 1939.
18. *N. S. Sventickij*, Stabilisation of A. C. Arc used for Quantitative Spectrographic Analysis (Russian), *Zavodskaya Lab.* **8**, 470, 1940.
19. *Carl Zeiss and H. Kaiser*, Einrichtung zur Erzeugung eines Abreissbogens zur Spektralanalyse, German patent No. 699 052, 1940.
20. *W. C. Heraeus and K. Pfeilsticker*, Verfahren zum Anregen von Spektren, German patent No. 709 179, 1941.
21. *R. Schmidt*, A normalized D. C. Interrupted Arc for Spectrochemical Analysis, *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **60**, 378, 1941.
22. *N. S. Sventickij*, A. C. Arc as a Light Source for Quantitative Spectrographic Analysis (Russian), *Bull. Acad. Sci. USSR. Sér. Phys.* **5**, 222, 1941.
23. *H. Hemmendinger*, Time Effects and Arc Intensities, *J. Opt. Soc. Amer.* **32**, 149, 1942.
24. *F. C. Brockmann and F. F. Hochgesang*, Electrical Ignition of the Spectrographic Arc, *Ind. Eng. Chem. Anal. Ed.* **14**, 796, 1942.
25. *A. Bardócz*, The production of a Series of electric Spark Discharges of identical Energy Content (Hungarian). Hungarian Electrotechnical Association, Budapest, 1942. *Elektrotechnika* **36**, 25 and 114, 1943.
26. *R. Bussien*, *Automobiltechnisches Handbuch*, Herbert Cram, Berlin 1942.
27. *Carl Zeiss and H. Kaiser*, Anordnung zur Funkenerzeugung für die Spektralanalyse, German patent No. 735 033, 1943.
28. *M. P. Hasler and H. W. Dietert*, A new Spectroscopic Source Unit, *J. Opt. Soc. Amer.* **33**, 218, 1943.
29. *J. L. Sanderson and V. J. Caldecourt*, Accessory Equipment for Spectrochemical Analysis, *J. Opt. Soc. Amer.* **34**, 116, 1944.
30. *R. Schmidt and A. Schuringa*, An Interrupted Direct-Current Arc for Spectrochemical Analysis, *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **64**, 349, 1945.
31. *N. S. Sventickij*, Present-day Sources of Light for Spectrographic Analysis (Russian), *Bull. Acad. Sci. USSR Sér. Phys.* **9**, 677, 1945.
32. *V. J. Caldecourt and J. L. Sanderson*, A Combination Arc Spark Source for Magnesium Analysis, *J. Opt. Soc. Amer.* **36**, 99, 1946.
33. The Dow Chemical Co., Magnesium Laboratory Methods, Spectrographic Analysis 1946.
34. *C. Braudo and H. R. Clayton*, An Improved Spectrographic Source, *J. Soc. Chem. Ind.* **66**, 259, 1947.
35. *N. S. Sventickij*, The Steelscope and its Applications (Russian), O. G. J. Z. (Techniko Ieoreticheskij) (Technical-Theoretical), Moscow-Leningrad 1948.
36. *A. Bardócz*, Electric Spark Generator for Spectrochemical Analysis with Aperiodically Damped Charging Current Circuit, *Műgyetemi közlemények* **1**, 1, 1948.
37. *D. A. Sinclair*, A Condensed Arc Source Unit for Spectrochemical Analysis, *J. Opt. Soc. Amer.* **38**, 547, 1948.
38. *A. Bardócz*, Synchronous Switches for Electric Spark Generators used in Spectrochemical Analysis, *Műgyetemi Közlemények* **3**, 1, 1948.
39. *H. J. Enns and R. A. Wolfe*, An Air Interrupter Type Spectrographic Light Source, *J. Opt. Soc. Amer.* **39**, 298, 1949.
40. *G. J. Braudo, J. D. Craggs and G. C. Williams*, On the Excitation Temperature in a Spectroscopic Spark Source, *Spectrochim. Acta* **3**, 546, 1949.
41. The British Aluminium Co. Ltd., Analysis of Aluminium and its Alloys, 1949.
42. *J. Mika, F. Macher and B. Vorsatz*, Der Niederspannungsfunkens als Lichtquelle der quantitativen Spektralanalyse. *Anal. Chim. Acta* **3**, 228, 1949.
43. *W. Marti*, Ein Generator für rechteckförmige, bogenähnliche Stromimpulse, *Spectrochim. Acta* **4**, 43, 1950.
44. *H. M. Crosswhite*, Photoelectric Intensity Measurements in the Iron Arc, *Spectrochim. Acta* **4**, 122, 1950.
45. *R. J. Dwyer*, A Variable Frequency Electronic Interrupter for Direct Current Arc, *J. Opt. Soc. Amer.* **40**, 180, 1950.
46. *T. Török*, Quantitative Spektralanalyse der Verunreinigungen in Aluminium und seinen Legierungen, *Acta Chimica Hungarica* 1950. (In the press.)

ПРЕРЫВИСТЫЙ ДУГООБРАЗУЮЩИЙ АППАРАТ ДЛЯ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА

А. Бардоц

Резюме

Работа в введении знакомит с основными принципами прерывистого дугообразующего аппарата и дает обзор построенных до сих пор аппаратов, разбив их на четыре группы. После этого подробно знакомит с конструкцией и с достигнутыми результатами такого прерывистого дугообразующего аппарата, о котором был известен до сего времени только основной принцип по имеющимся патентным описаниям. Сущностью этого прерывистого дугообразующего аппарата является высоковольтная цепь зажигания дуги, которая кроме одного трансформатора Тесла другого высоковольтного элемента не имеет. Образование напряжения зажигания происходит с помощью управляемой низковольтной цепи. Аппарат может быть настроен на различные режимы работы гораздо легче, чем примененные до сего времени аппараты, а повторяемость тождественна с известными до настоящего времени лучшими аппаратами.

A NEW METHOD FOR INVESTIGATING RELAXATION PROCESSES

by

I. P. VALKÓ and GY. GERGELY.

RESEARCH LABORATORY FOR TELECOMMUNICATION, BUDAPEST

(Presented by Z. Gyulai — Received 13. VII. 1951)

A new compensating method was developed for the investigation of relaxation phenomena governed by several exponential processes. The electric compensating pulse, consisting of a sum of exponentials, is produced by means of RC networks. Each of them controls a separate pentode, the pentodes having a common load resistance for adding the components. The method was applied to the investigation of the rise and decay phenomena of willemite luminescence.

The usual method used for the investigation of the time dependence of physical processes e.g. relaxation processes, is that of producing by some means a voltage which is proportional to the investigated quantity, and examining its oscilloscope pattern. This oscillogram has to be analysed by graphical or numerical methods in order to find its corresponding simple mathematical expression. For example, if the task is to investigate a fast light phenomenon, the light is received on the cathode of a photocell or photoelectric multiplier, and the output voltage of this device is applied to an oscillograph.

If the process can be approached by an exponential function, the measurement may be carried out by electronic means. In that case the signal voltage is combined by some means, in the oscillograph with a second voltage having exactly exponential form and having a time constant which can be varied at will. This time constant has to be varied, until the oscilloscope pattern attains a simple and characteristic figure.

1. One of the solutions rests upon the principle that the amplification of an amplifier may be influenced at will. Let the investigated signal voltage have the form:

$$V = V_0 e^{-\alpha t}.$$

Applying an amplifier whose amplification has an exponential variation

$$A = a e^{\beta t} \quad \text{and} \quad \alpha = \beta$$

the amplified voltage

$$V' = VA = V_0 a$$

and a horizontal line appears on the screen of the oscilloscope, independent of time.

Unfortunately exponential variation of the amplification is a very hard condition. It can be realised by usual methods of automatic amplification

control, if V_0 is modulated by means of high frequency. This is the case with regard to the decay of acoustical vibrations in a room. In fact, this method was especially developed for acoustical purposes and was never practically used for any other purpose [1], [2].

2. Another method used for acoustical reverberation measurements is that of employing a non-linear amplifier where the output voltage is proportional to the logarithm of the input :

$$A = a \log V$$

$$V' = a \log V_0 - a t a .$$

The oscillogram is a straight line with a direction depending on the time constant.

3. A third method was used by *Henderson* and *Strange* [3] for the investigation of the rise and decay of fluorescence. They used a specially built cathode ray tube which had several pairs of vertical plates instead of one pair. One set of plates received the voltage corresponding to the brightness, the next set an exponential voltage of opposite polarity and equal magnitude. In this case the two vertical deflections compensated each other and the result was a simple horizontal line.

4. Recently *Tolstoy* and *Feofilov* [4] developed a different method. They controlled the vertical plates of a simple oscilloscope with a voltage proportional to the quantity investigated, and the horizontal plates by an exponentially decaying voltage of variable time constant. They have shown that the equation of the resulting oscillogram is :

$$y = x^{\frac{\alpha}{\beta}} .$$

If $\alpha = \beta$ we get a straight line.

Comparing the above methods, it is apparent that methods 1. and 2. are difficult to realize because of the need of a perfectly exponential change of amplification, and of a perfectly logarithmical amplification respectively. In methods 3. and 4. the signal voltage and the compensating voltage are amplified by different amplifiers. For correct operation the perfect matching of the amplifiers is necessary.

Methods 1. 2. and 4. are adopted especially for evaluating the time constants of a single exponential process. In practice, however, the relaxation processes are often approximated by a series of exponential functions. Let the signal voltage have the form :

$$V = V_1 e^{-\alpha_1 t} + V_2 e^{-\alpha_2 t} + V_3 e^{-\alpha_3 t} + \dots .$$

The examination of the four methods shows that 1. is useless, 2. gives a broken polygon line, which has to be evaluated by further mathematical operations.

The difficulty with methods 3. lies in the manufacturing of special CR tubes, since in addition to the usual two sets of plates each member of the approximating series requires a further vertical set of plates. Technical reasons limit the application of the method to two or three components. In the above-mentioned paper [3] a two component compensating system is described.

Tolstoy and *Feofilov* did not develop the superposition of more exponentials and their method is not very suitable for this purpose.

Experimental arrangement

A simple compensating method was developed which seems to be free from the above disadvantages. Its principle is the subtraction of an exponential polynomial from the investigated function. Number and value of coefficients and exponents is varied until the difference vanishes. Addition and subtraction of the members is carried out by electrical means.

A simple solution would be the connecting of the corresponding voltage sources in series. In this case, however, the sources have no common reference voltage level and this »floating« may cause difficulties. Parallel connection of the sources means another method of electrical addition, — the addition of currents — but the resulting current depends on the different source resistances.

The difficulties are avoided by applying electron tubes. Each compensating voltage is controlling the grid circuit of a different high resistance pentode, and the plate currents (which are proportional to the grid voltages) are added on the common load resistance. This process is apt to develop any wave whatever as any function can be approximated through some kind of series of elementary functions which may be represented through elementary electrical circuits. Any refinement of the approximation means adding only one member more to the series, that is connecting one more tube parallel to the others. The small change resulting in the resistance of the parallel circuits caused by such a connection can be calculated as it depends only on the tube, and not on its control grid circuit.

While the method is quite general, its chief application is in the investigation of exponential relaxation processes. The compensating apparatus was employed for the measurement of luminescent materials. The rise and decay of luminescence of willemite specimens excited by cathode rays were investigated.

The experimental arrangement described in a previous paper [5] was equipped with the compensating device. Fig. 1 shows the schematic diagram of the experimental arrangement. A square wave generator or pulse generator is controlling the cathode ray tube to whose screen the luminescent material under investigation is applied, at the same time as the compensating device.

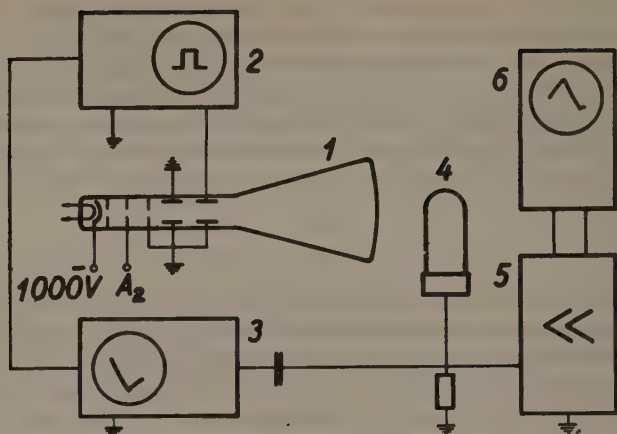


Fig. 1. Schematic diagram of the experimental arrangement. Notations on the figure: 1. Cathode Ray tube, 2. Square wave generator or pulse generator, 3. Compensating apparatus, 4. Multiplier phototube 931A, 5. Amplifier, 6. Oscilloscope.

A multiplier phototube measures the brightness of the specimen by producing voltage pulses on its load resistance proportional to the rise and decay of luminescence. The compensating device produces the same voltage on the load resistance — but in opposite phase. The resulting pulses are amplified

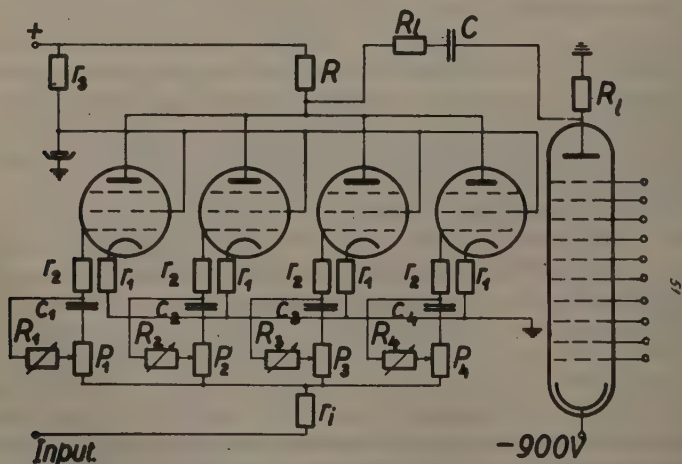


Fig. 2. Circuit diagram of the compensating apparatus.

and brought to the plates of an oscilloscope. In the case of a suitable compensation, the oscilloscope pattern is a straight horizontal line.

Fig. 2 shows the circuit diagram of the compensating apparatus. The square wave voltage appears on potentiometer P_1 and part of this voltage charges condenser C_1 through the variable resistance R_1 . In the next half wave C_1 discharges through R_1 . The time constant of the circuit is controlled by the variation of R_1 and if necessary by C_1 . The instant voltage of C_1 serves as control voltage for tube 1. The amplitude is controlled by P_1 .

A similar circuit is that of potentiometer P_2 , resistance R_2 and condenser C_2 . P_2 and R_2 can be set independently of P_1 and R_1 . The same applies in the case of the other circuits. The number of circuits is not limited practically.

A necessary condition is that the electron tubes should have linear amplification. This is achieved by the application of negative feedback, which also makes the amplification more independent of tube characteristics.

The resulting superposition of exponential voltages on the load resistance is mixed by means of a high capacity condenser to the investigated voltage appearing on the multiplier load resistance. Suitable resistance and capacity values must be chosen to prevent distortions.

Theory of exponential relaxation processes

The exponential (monomolecular) relaxation processes are governed by a linear differential equation of the form:

$$\frac{df}{dt} = a + bt$$

f denoting the relaxation function, t the time, a and b being constants.

Many physical processes may be described by the above differential equation.

Applying V_0 voltage through resistance R to a condenser C , the voltage on the condenser during the charging of the condenser — may be described by the differential equation:

$$CR \frac{dV}{dt} + V = V_0 \quad (1)$$

and during the discharge:

$$CR \frac{dV}{dt} + V = 0 \quad (2)$$

Solving the equations we get:

$$V = V_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{RC}} \right) \quad \text{charge} \quad (3)$$

$$V = V_0 \left(1 - e^{-\frac{T}{RC}} \right) e^{-\frac{t}{RC}}, \quad \text{discharge} \quad (4)$$

where the duration of charging is T .

The brightness of a luminescent specimen may be treated by similar equations.

$$I = I_0 (1 - e^{-\beta t}) \quad \text{rise} \quad (5)$$

$$I = I_0 (1 - e^{-\beta T}) e^{-\alpha t} \quad \text{decay} \quad (6)$$

β being the exponent of rise, α of the decay.

If the time of excitation or the charging of the condenser T is $T \gg RC$, or $T \gg \frac{1}{\beta}$ the process is in complete equilibrium. $V = V_0$ and $I = I_0$ during the rise.

Now, let us discuss the possibility of compensating the photomultiplier pulses with the voltage produced by the condenser charging and discharging.

Comparing equations 3 with 5 and 4 with 6, it may be seen that an entirely exact compensation is not possible, because of the different exponents β and α in the rise and decay of luminescence.

If $I_0 = V_0$ and $\beta = \frac{1}{RC}$, the rise alone, and if $\alpha = \frac{1}{RC}$ the decay alone is compensated.

The problem is more difficult if the relaxation process cannot reach equilibrium between two consecutive excitations, i. e. the expression $e^{-\beta T}$ is not negligible. This case is met with in many substances.

For luminescent materials used in practice α and β are so great, that with $T = 10$ millisecc. the light intensity is still far from equilibrium. The lengthening of T is not practical because of the band width and the low frequency cut-off of the amplifier.

The equations for the relaxation process by square wave and pulse excitations were solved in a general manner by *Williams* and *Eyring* [6] and by *Gergely* [5]. It was shown that by denoting $f = e^{-\beta T}$, $g = e^{-\alpha T}$ the brightness of luminescence is given by:

$$I = I_0 \left(1 - e^{-\beta t} \frac{1-g}{1-fg} \right) \quad \text{rise} \quad (7)$$

$$I = I_0 \frac{1-f}{1-fg} e^{-\alpha t} \quad \text{decay} \quad (8)$$

t being measured from the start of the rise and decay. The light at the beginning of the decay and at the end of the rise is given by:

$$I_e = I_0 \frac{1-f}{1-fg} \quad (9a)$$

The amplitude of an oscilloscope pattern :

$$\Delta I = I_0 \frac{1-f}{1-fg} (1-g), \quad (9b)$$

see notations of Fig. 3.

Only the last quantity ΔI may be determined from the oscilloscope pattern, but not the quantity I_c . Similarly, I_0 cannot be determined by the simple square wave method.

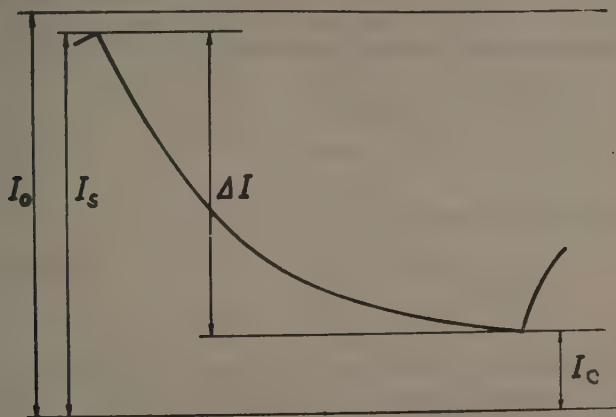


Fig. 3. Oscilloscope pattern of a luminescence decay curve.

Tolstoy and *Feofilov* [4] described a method for the determination of the unknown quantities. They used a rotating disk for modulating the light, which falls upon the cathode of the phototube, in order to establish a level of zero brightness for the determination of I_c .

By switching off the square wave generator and bombarding the luminescent screen with the same electron beam as used by pulsing, the amplitude of I_0 may be determined.

For the condenser charge and discharge in the stationary state the following equations hold: denoting $e^{-\frac{t}{RC}} = \varphi$

$$V = V_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{RC}} \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \right) \quad \text{for the charging} \quad (10)$$

$$V = V_0 \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} e^{-\frac{t}{RC}} \quad \text{for the discharging} \quad (11)$$

and

$$V_e = V_0 \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \quad (12a)$$

$$\Delta V = V_0 \frac{(1-\varphi)^2}{1-\varphi^2} \quad (12b)$$

similarly with 7, 8, 9.

Naturally V_e cannot be determined, except by using a direct current amplifier. This arrangement, however, offers no difficulties, for the direct current component of the condenser voltage is entirely uninteresting, and only the alternating current voltages are relevant in the compensation process.

When the multiplier voltage is compensated for the decay period, then :

$$F = I - V = I_0 \frac{1-f}{1-fg} e^{-\alpha t} - V_0 \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} e^{-\frac{t}{RC}} = \text{const} \quad (13a)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

from equation 13a we have :

$$\alpha = \frac{1}{RC}, \quad \varphi = g = e^{-\alpha \tau}$$

$$I_0 \frac{1-f}{1-fg} = V_{od} \frac{1-g}{1-g^2} \quad (14a)$$

The compensation is therefore possible. The corresponding I_0 and V_{od} are different. It may be shown that $F = 0$ for any time whatever.

For the compensation of the rise with the former notations :

$$F = I - V = I_0 \left(1 - e^{-\beta t} \frac{1-g}{1-fg} \right) - V_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{RC}} \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \right) = \text{const} \quad (13b)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

$$\beta = \frac{1}{RC}, \quad \varphi = f = e^{-\beta \tau}$$

$$I_0 \frac{1-g}{1-fg} = V_{or} \frac{1-f}{1-f^2} \quad (14b)$$

in this case the compensation can only give $F = \text{const.}$ and not $F = 0$ as for the decay.

V_{or} and V_{od} may be determined from the oscilloscope pattern taking $RC \rightarrow 0$, making the pattern almost rectangular.

The third important form of measurements is the short pulse excitation method. In this case the excitation time τ is very short, 1–500 microsec. whereas the decay time is long enough to reach approximately 0 brightness at the end of the decay, (20 millisec.).

The last case may be treated similarly to the square wave excitation. Denoted now by $f = e^{-\beta t}$, $g = e^{-\alpha \tau}$ we have similarly to equation (7)

$$I = I_0 \left(1 - e^{-\beta t} \frac{1-g}{1-fg} \right). \quad (7a)$$

In our measurements with $T = 20$ millisecc. and $\tau = 5-500$ microsecc., the factor became

$$\frac{1-g}{1-fg} \cong 0.99 - 1.$$

Compensating the rise, similarly to (13b)

$$F = I - V = I_0 (1 - e^{-\beta t}) - V_{or} \left(1 - e^{-\frac{t}{RC}} \right) = \text{const.} \quad (13c)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0,$$

$$\beta = \frac{1}{RC}, \quad I_0 = V_{or}, \quad (14c)$$

and compensating the decay :

$$F = I - V = I_0 (1 - e^{-\beta \tau}) e^{-\alpha t} - V_0 \left(1 - e^{-\frac{\tau}{RC}} \right) e^{-\frac{t}{RC}} = \text{const.} \quad (13d)$$

$$\alpha = \frac{1}{RC}, \quad I_0 (1 - e^{-\beta \tau}) = V_{od} (1 - e^{-\alpha \tau}), \quad I_0 \neq V_{od}. \quad (14d)$$

The above discussion is valid when the relaxation process is governed by a single exponential.

In practical cases, by investigation of cathode ray screens, the decay and rise are described only by the superposition of several exponentials. Each process is related to a band of the emission spectrum [7, 8].

Experimental results

Investigating Zn_2SiO_4 -Mn specimens, it was found that the rise and decay process could be described by the superposition of three exponentials.

Fig. 4. shows the decay curve of luminescence for square wave excitation. $T = 10$ millisecc.

Fig. 5. show the individual compensating components.

Fig. 6. shows the compensated decay curve.

Similar patterns are found by the compensation of the rise curve.

Fig. 7. show the grades of incomplete compensation.

Starting from similar patterns, the suitable variation of the time constant makes the concave or convex line straight.

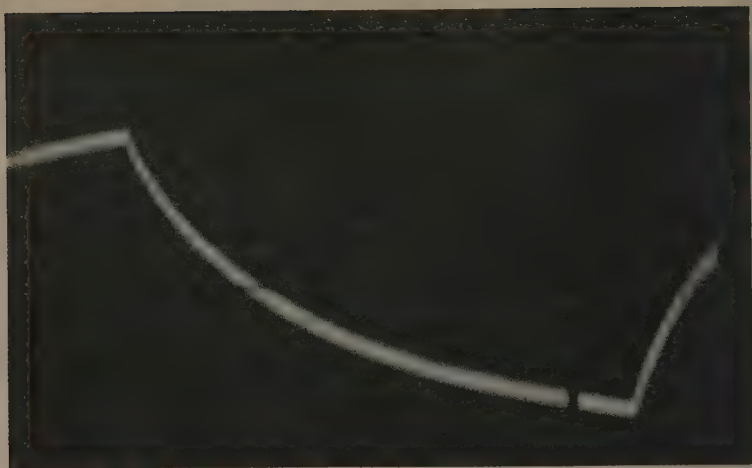


Fig. 4. The decay curve for square wave excitation, $T = 10$ msec.

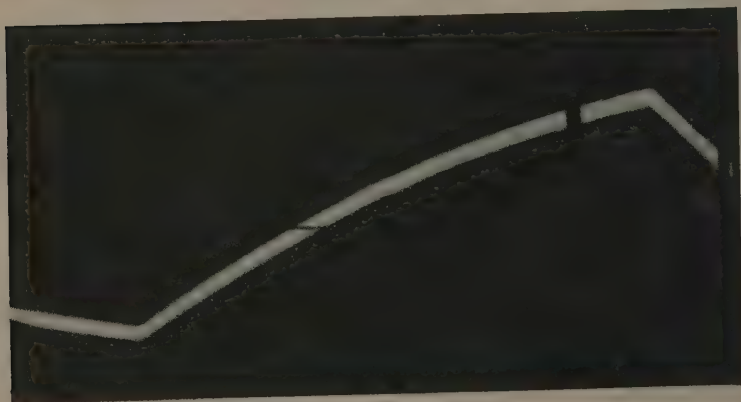


Fig. 5/a.

The accuracy of compensation of I_2 and I_3 is less than that of I_1 because of their small amplitude and time constant.

As was shown in paper [5] the more precise investigation of components I_2 and I_3 requires the application of shorter excitation pulses.

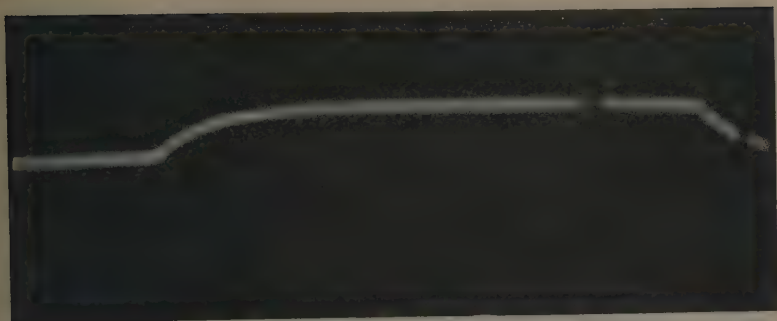


Fig. 5/b.

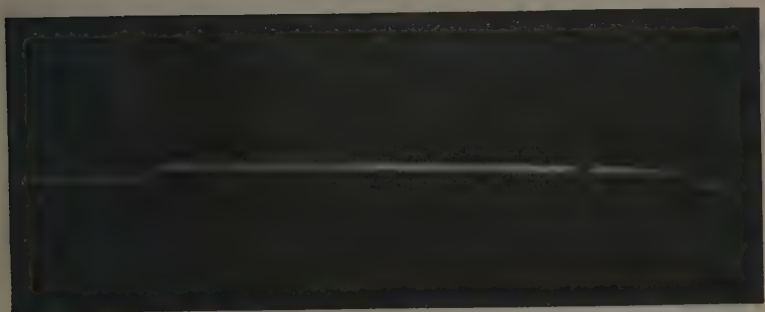


Fig. 5/c.

Fig. 5/a, 5/b, 5/c. The compensating components of the decay curve of Fig. 1.

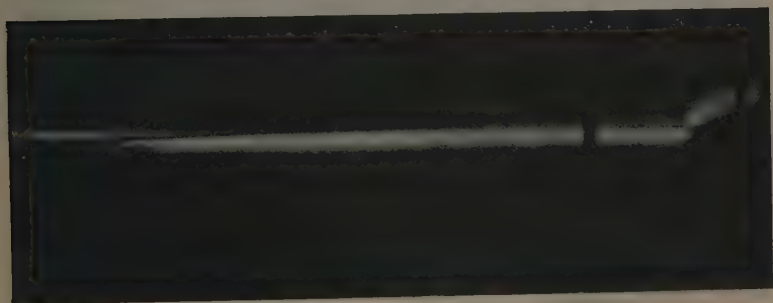


Fig. 6. The compensated decay curve of Fig. 4.

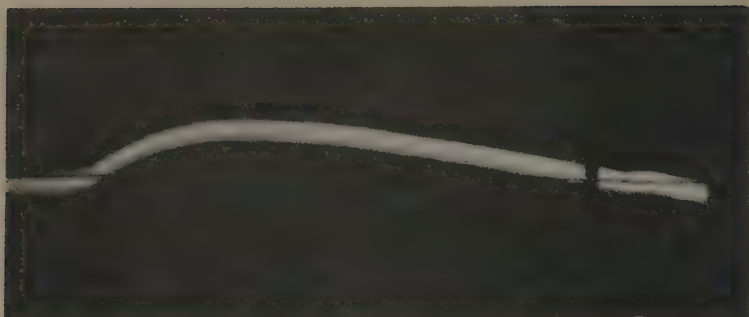


Fig. 7/a.

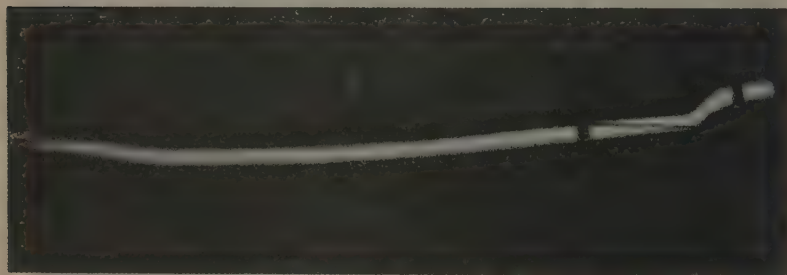


Fig. 7/b.

Fig. 7. Incomplete compensations. Fig. 7/a. $1/RC > a$, Fig. 7/b $1/RC < a$

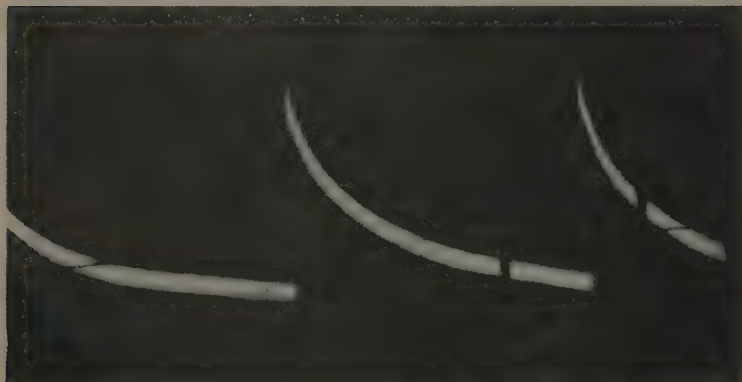


Fig. 8. The rise and decay curve for pulse excitation, $\tau = 500$ microsec.

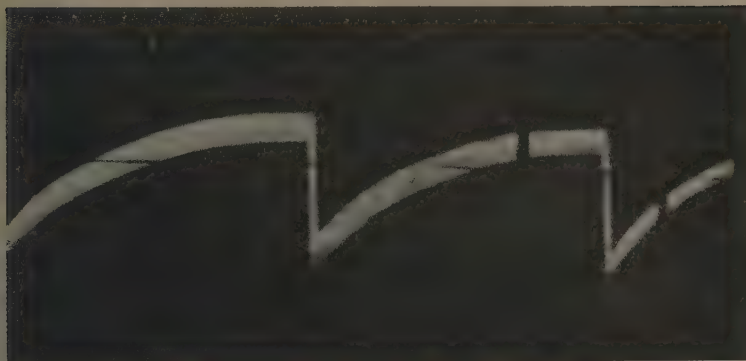


Fig. 9 a.

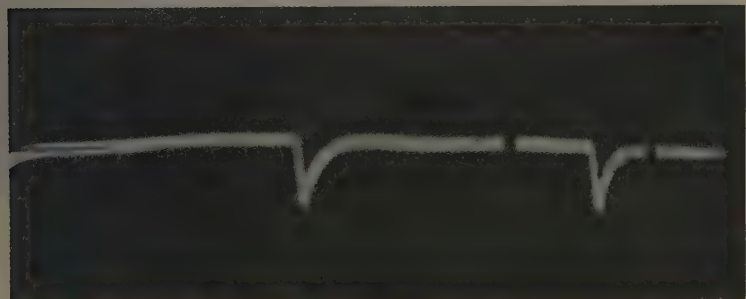


Fig. 9.b.

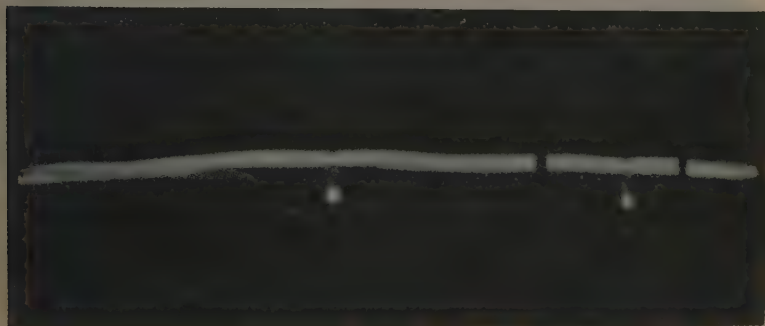


Fig. 9 c.

Fig. 9/a, 9/b, 9/c. The compensating components of the decay curve of Fig. 8.

Component I_2 was measured by 500 microsec. excitation time. Fig. 8 shows the decay curve for $\tau = 500$ microsec. $T = 19,5$ millisec. Figs. 9 show the single compensating components. Nearly the same results were got for α_2 and β_2 as by the square wave measurements.

α_3 was determined by using 5—25 and 50 microsec. excitation pulses. Fig. 10 shows the rise and decay curve for $\tau = 25$ microsec. Fig. 11. shows the decay curve, when only the I_3 component is compensated.

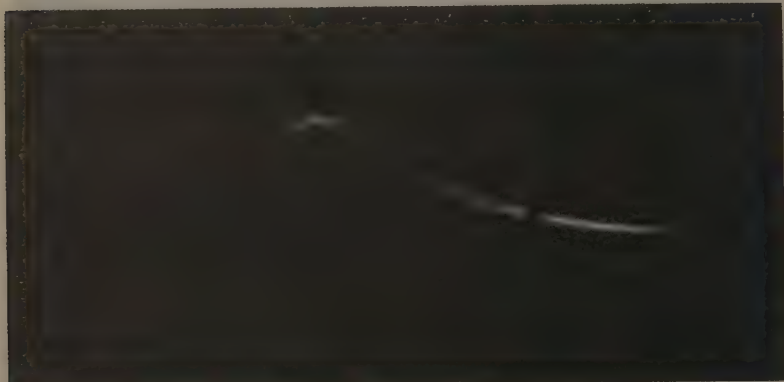


Fig. 10. The rise and decay curve for pulse excitation $\tau = 25$ microsec.

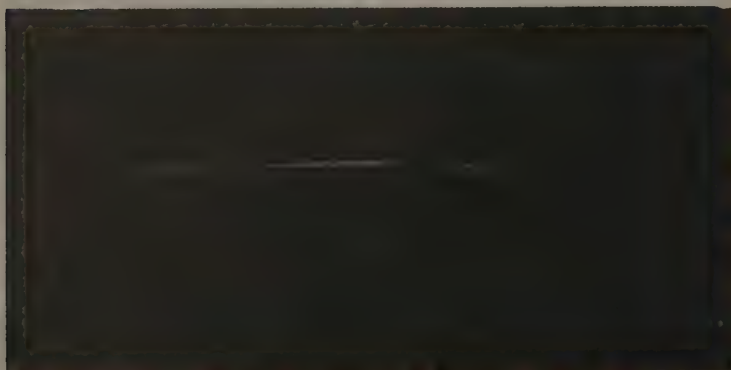


Fig 11. The brightness components $I_1 + I_2$ of the decay curve of Fig. 10. Component I_3 is compensated.

Table I shows the experimental results.

The columns I_1 , I_2 and I_3 contain the data of the single light components. α_m and β_m denote the time constants, measured by the compensating method. α_c and β_c denote α and β calculated by the graphical method, described in paper 5.

I_{odm} and I_{orm} are the light amplitudes of the single decay and rise components, calculated from the compensation measurements data by the help of formula 14/a and 14/b, I_{odc} and I_{orc} are determined by the graphical method.

The precise determination of α_2 , α_3 and β_2 , β_3 is not possible by the graphical method.

Rows 9 and 10 of Table I show the proportion of the single components, determined by the square wave and by the short pulse method (row 10).

TABLE I

		I_1	I_2	I_3	ΣI_k
1	α_m	132	1080	$6.25 \cdot 10^4$	
2	α_c	127			
3	β_m	270	1930	$7 \cdot 10^4$	
4	β_c	263			
5	I_{odm}	51	8,5	2,5	62
6	I_{orm}	54,7	8,5	2,5	65,7
7	I_{odc}	52	9	2,5	63,5
8	I_{orc}	55	9	2,5	64,5
9	$I_{ok} \%$	83	13,1	3,9	100
10	$I'_{ok} \%$	85,5	10,85	3,65	100

It may be seen from Table I that the compensation of the rise and decay curve and the graphical evaluation do not give exactly the same results. The differences are caused by the significant line thickness of the oscilloscope traces (2—3 millimeter), the last being caused by the noise of the phototube.

A possible further improvement of the method lies in the simultaneous compensation of the rise and decay curves. That seems to be possible if separate resistances are applied for charging and discharging the same condenser and series diodes are used to control the two paths of current.

REFERENCES

1. W. Tak: Philips Techn. Rundschau, **8**, 82, 1946.
2. H. Thiede: Elektr. Nachr. Tech. **13**, 84, 1936.
3. J. W. Strange, S. T. Henderson: Proc. Phys. Soc. (London) **58**, 369, 1946.
4. H. A. Толстой, П. П. Феофилов: Успехи Физ. Наук, **XLI**, 1, 44, 1950.
5. Gy. Gergely: Journ. Opt. Soc. Am. **40**, 353, 1950.
6. F. E. Williams, H. Eyring: J. Chem. Phys. **15**, 289, 1947.
7. E. Nagy: Journ. Opt. Soc. Am. **40**, 407, 1950.
8. E. Nagy, Gy. Gergely: Acta Phys. Hung. **1**, 127, 1951.

НОВЫЙ МЕТОД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ

И. П. Валко и Д. Гергель

Резюме

Новый метод компенсации для исследования релаксационных явлений, состоящих из ряда экспоненциальных компонентов.

Электрический компенсирующий сигнал, являющийся суммой экспоненциальных кривых получается с помощью цепей RC. Каждый из этих цепей управляет по одному из пентодов и компоненты складываются на общем для всех пентодов рабочем сопротивлении.

Метод используется при исследовании периода продолжительности процесса люминесценции. Доказывается, что кривая возрастания интенсивности и угасания света может быть выражена через суперпозицию трех экспоненциальных функций.

Возможность исследования компенсации при времени возбуждения 10 миллисекунд, и в микросекунду.

КОРРЕКЦИЯ ФОРМУЛЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ФЕРМИ

Р. ПАУНЦ

Университет г. Сегед. Институт теоретической физики

(Представлено П. Гомбашом. — Поступила: 19. IX. 1951.)

Дано, что N свободных электронов заперты в кубе объемом V , при очень низкой температуре. Среднюю кинетическую энергию электронов можно вычислить двояким путем: а) на основе статистического метода ферми, б) моделью коробки квантовой механики. Величины, рассчитанные по двум упомянутым методам, в случае небольшого числа электронов ($N < 100\,000$) дают очень большие отклонения, т. е. формула Ферми дает на много меньшую величину. Отклонение может быть также полностью искоренено, если в выводе Ферми учтем тот факт, что величина ни одного из компонентов импульса не может быть равна нулю, соответственно этому из шара импульса вырезаем слой толщиной $2d$ вдоль по плоскостям координат. Учитывая полученный таким образом объем эффективного импульса, придерживаясь хода мысли вывода Ферми, получаем подлинную формулу кинетической энергии Ферми и плюс коррекционные члены. Корректированные величины показали очень хорошее совпадение с величинами, полученными путем вычислений по квантовой механике.

Предположим, что N свободных электронов закрыты при очень низкой температуре в объем V (непроницаемые стенки). Среднюю кинетическую энергию электронного газа можем вычислить двояким путем:

а) *Модель коробки квантовой механики.* Пусть объем V будет куб с стороной a , возможные величины энергии следующие:

$$\varepsilon = \frac{h^2}{8m} \frac{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}{a^2} \quad \begin{matrix} n_x = 1, 2, \dots \\ n_y = 1, 2, \dots \\ n_z = 1, 2, \dots \end{matrix} \quad (1)$$

Среднюю энергию (которая чисто кинетическая энергия, так как внутри коробки потенциальную энергию можем принять равным нулю) определяем таким образом, что если самые низкие состояния заполняются суксессивно (если примем во внимание принцип Паули, то тогда в каждом квантовом состоянии можем разместить только два электрона с противоположным направлением спина) и сумму энергии, рассчитанную при помощи (1) делим на число электронов (N).

Из точки зрения нижеследующих важным является то, что ни одно квантовое число не может быть равно нулю. То есть в этом случае соответствующая собственная функция

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{n_x \pi}{a} x \sin \frac{n_y \pi}{a} y \sin \frac{n_z \pi}{a} z \quad (2)$$

была-бы равна нулю (однако функция косинус не может быть собственной функцией, так как не удовлетворяет предельным условиям). •

б) *Статистика Ферми-Дирака* (при очень низкой температуре). На основе этого метода средняя кинетическая энергия электронов N будет следующей :

$$\bar{E} = \frac{h^2}{8m} \frac{5}{3} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}. \quad (3)$$

Для сравнения выделяем из средних величин энергии, рассчитанных как по методу а) так и по методу б) общий множительный фактор

$$\frac{h^2}{8m} \frac{1}{a^3} = \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{1/3}},$$

остающаяся часть в обоих случаях зависит исключительно от N . Величины последнего приведены в таблице 1.

ТАБЛИЦА 1.

N	Кв	Ферми
1	3	0.58
10	6	2.69
20	8.10	4.29
30	9.93	5.62
40	11.40	6.80
50	12.80	7.90
100	18.50	12.53
1000	70.12	58.18

Из рассмотрения таблицы видно, что величины рассчитанные на основе формулы Ферми значительно меньше, чем величины рассчитанные по квантовой механике. (Процентное отклонение даже при 1000 выше 20%).

В дальнейшем показываем, что это отклонение может быть почти полностью исключено, если, придерживаясь хода мыслей Ферми, используем тот факт, что величина ни одного из компонентов импульса не может быть равна нулю.

Эффективный импульсный объем

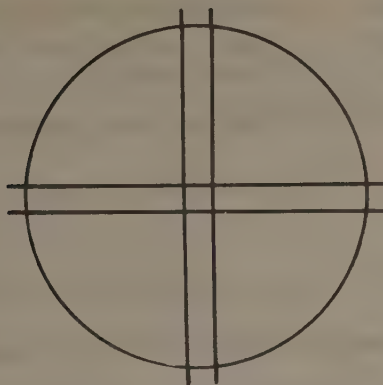
На основе модели коробки квантовой механики можно показать, что величина ни одного из компонентов импульса не может быть равна нулю.

Квадрат компонента x импульса дает следующую величину :

$$E_x = \frac{1}{2m} P_x^2 = \frac{1}{2m} \frac{h^2}{4a^2} n_x^2. \quad (4)$$

Так, как n_x не может быть равен нулю, так P_x^2 и следовательно также и P_x не могут быть равны нулю. Сходное получается и в случае других двух компонентов импульса.

Этот факт можем использовать при статистическом выводе Ферми таким образом, что слой соответствующей толщине плоскостей координат $P_x = 0$ $P_y = 0$ $P_z = 0$, вырезаем из поля импульса и расчет ведем с оставшимся объемом эффективного импульса. Наилучшее совпадение с величиной



Объем эффективного импульса

квантовой механики получаем тогда, если толщина вырезаемой части равна величине наименьшего возможного компонента импульса:

$$2d = \frac{h}{2a} \quad (n_x = 1). \quad (5)$$

Расчет максимальной энергии

Фазовый объем, соответствующий электронам N , по статистике Ферми-Дирака (при низких температурах) $N \frac{h^3}{2}$ это должно быть равно произведению объема V и объема эффективного импульса $V_{\text{эфф}}$:

$$V \cdot V_{\text{эфф}} = N \frac{h^3}{2}. \quad (6)$$

На основе вышесказанного, объем эффективного импульса, получаем, если из шара, описываемого с максимальным импульсом p_μ , вырежем три слоя шара толщиной в $2d$ вдоль по плоскостей координат. Величина оставшегося объема эффективного импульса (см. приложение):

$$V_{\text{эфф}} = \frac{4}{3} \pi (p_\mu^3 - 4,5 p_\mu^2 d + 5,7295 p_\mu d^2 - 1,9098 \frac{d^3}{p_\mu} - 0,40986 d^3). \quad (7)$$

Введем обозначение:

$$p_\mu = r_\mu d \quad (8)$$

тогда $V_{\text{эфф}}$ может быть записано:

$$V_{\text{эфф}} = \frac{4}{3} \pi d^3 (r_\mu^3 - 4,5 r_\mu^2 + 5,7295 r_\mu - 1,9098 \frac{1}{r_\mu} - 0,40986). \quad (9)$$

Подставляем эту формулу в уравнение (6) и примем во внимание, что по (5).

$$d^3 = \frac{h^3}{64 a^3} = \frac{h^3}{64 V}. \quad (10)$$

Произведя соответствующие упрощения, для r_μ получаем следующие уравнения:

$$r_\mu^3 - 4,5 r_\mu^2 + 5,7295 r_\mu - \frac{1,9098}{r_\mu} - 0,40986 = \frac{24}{\pi} N. \quad (11)$$

Подставляем:

$$r_\mu = \sqrt[3]{\frac{24}{\pi} x} \\ x^3 - 2,28485 x^2 + 1,4771 x - \frac{0,12693}{x} - 0,05365 = N. \quad (12)$$

При числовом решении уравнения (12) для различных величин N получаем x , как функцию N . В таблице II. приводим несколько величин x . Полученные числовые величины могут быть отлично аппроксимированы с помощью следующего выражения:

$$x = N^{1/3} + 0,7616 + \frac{0,081}{N^{1/3}} - \frac{0,031}{N^{2/3}}. \quad (13)$$

Подставляя соотношение

$$r_\mu = \sqrt[3]{\frac{24}{\pi} x}, \quad p_\mu = r_\mu, \quad d = r_\mu \frac{h}{4 V^{1/3}}$$

для максимального импульса получаем:

$$p_\mu = \frac{h}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \left(1 + \frac{0,7616}{N^{1/3}} + \dots \right). \quad (14)$$

Следовательно в результате нашего вывода мы получили выражение Ферми и плюс коррекционные члены.

ТАБЛИЦА II.

N	Числ.	Аппр.
1	1,8118	1,8116
10	2,9466	2,9469
20	3,5015	3,5016
30	3,8917	3,8917
40	4,2027	4,2027
50	4,4655	4,4652
100	5,4195	5,4192
1000	10,7698	10,7697

Вычисление средней энергии

Число тех электронов, импульс которых лежит в объеме эффективного импульса между p и $p + dp$, можем определить при помощи соотношения (6). То есть, если радиус импульсного шара увеличен на dp , тогда изменение объема эффективного импульса $dV_{\text{эфф}}$ находится в следующей связи с изменением числа частиц dN :

$$V \cdot dV_{\text{эфф}} = dN \frac{h^3}{2} \quad (15)$$

величина $dV_{\text{эфф}}$ на основе (9):

$$dV_{\text{эфф}} = \frac{4\pi}{3} d^3 \left(3r^2 - 9r + 5,7295 + \frac{1,9098}{r^2} \right) dr. \quad (16)$$

Принимая во внимание (10), для искомого электронного числа получаем:

$$dN = \frac{\pi}{24} \left(3r^2 - 9r + 5,7295 + \frac{1,9098}{r^2} \right) dr. \quad (17)$$

Суммарную энергию дает интеграл:

$$E = \int_{p_0}^{p_\mu} \frac{p^2}{2m} dN = \frac{d^2}{2m} \frac{\pi}{24} \int_{\sqrt{3}}^{r_\mu} (3r^4 - 9r^3 + 5,7295r^2 + 1,9098) dr \quad (18)$$

$$= \frac{d^2}{2m} \frac{\pi}{24} \left(\frac{3}{5} r_\mu^5 - \frac{9}{4} r_\mu^4 + \frac{5,7295}{3} r_\mu^3 + 1,9098 r_\mu - 2,3347 \right). \quad (19)$$

Подставляя величину d (5), а также на основании $r_\mu = \sqrt[3]{\frac{24}{\pi}} x$ получаем:

$$E = \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{1/3}} \left(\frac{3}{5} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} x^5 - 1,107838 x^4 + 0,47746 x^3 + 0,123x - 0,076 \right). \quad (20)$$

В эту формулу необходимо подставить величину x , полученную путем числового решения уравнения (12), а после деления на N получаем величину средней энергии. Полученная таким образом величина приведена в столбце с. (числ.) Таблицы III.

Приближенную, аппроксимационную формулу для средней энергии можем получить, если образуем частное:

$$\bar{E} = \frac{E}{N} = \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{1/3}} \frac{0,58183 x^5 - 1,107838 x^4 + 0,47746 x^3 + \dots}{x^3 - 2,28485 x^2 + 1,4771 x \dots} \quad (21)$$

(величину N подставляем из уравнения (12))

$$= \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{1/3}} \left(\frac{3}{5} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} x^2 + 0,221556 x + 0,124252 + \dots \right) \quad (22)$$

Подставляя аппроксимационное выражение x из (13):

$$\bar{E} = \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{1/3}} \left(\frac{3}{5} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} N^{1/3} + 1,1078 N^{1/3} + 0,725 + \dots \right) \quad (23)$$

Величины, рассчитанные на основании (23) находим в столбце b (аппр.) таблицы III. настоящей работы. Отклонение в сравнении с полученным числовым путем очень малы.

ТАБЛИЦА III.

N	Ферми a	Корректированные		Квант d
		аппр. b	числ. c	
1	0,58	2,41	2,61	3
10	2,69	5,80	5,82	6
20	4,29	8,02	8,03	8,10
30	5,62	9,78	9,80	9,93
40	6,80	1,32	1,33	1,40
50	7,90	12,70	12,72	12,80
60	8,92	13,98	13,99	14,10
70	9,88	15,17	15,18	15,17
80	10,80	16,30	16,31	16,37
90	11,68	17,37	17,38	17,46
100	12,53	18,40	18,41	18,50
1000	58,18	69,99	69,99	70,12

Из рассмотрения таблицы видно, что корректированная формула энергии хорошо приближается к величинам квантовой механики. Первый член корректированной формулы совпадает с подлинной формулой Ферми, следовательно коррекцию дают следующие члены:

$$\bar{E}_{\text{корр}} = \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{1/2}} (1,1078 N^{1/2} + 0,725) \quad (24)$$

Приложение

Вычисление объема эффективного импульса

Из объема $\frac{4}{3} \pi p_\mu^3$ шара радиусом P_μ надо высчитать три слоя шара

толщиной $2d$ вдоль по плоскости координат:

$$-6\pi p_\mu^2 d + 2\pi d^3$$

Однако при этом вычете дважды вычли общие части шаровых слоев, следовательно объем последних должен быть прибавлен. Объем общей части двух шаровых слоев может быть получен рассечением шара параллельными плоскостями $x = -d$, $x = +d$, $y = -d$, $y = +d$. Объем общей части дает следующий интеграл:

$$\begin{aligned} & 2 \int_{-d}^{+d} \int_{-d}^{+d} \sqrt{p_\mu^2 - x^2 - y^2} dx dy = \\ & = \frac{8}{3} (d^2 \sqrt{p_\mu^2 - 2d^2} + d (3p_\mu^2 - d^2) \arcsin \frac{d}{\sqrt{p_\mu^2 - d^2}} - p_\mu^3 \arcsin \frac{d^2}{p_\mu^2 - d^2}) \end{aligned}$$

в случае больших r (путем разложения квадратных корней и арксинуса) получаем следующую формулу:

$$8d^2 p_\mu - \frac{8}{3} \frac{d^4}{p_\mu} + \dots$$

Нам необходимо иметь трехкратное этой величины:

$$24d^2 p_\mu - 8 \frac{d^4}{p_\mu}.$$

При вычете величин шара трижды вычли, а у общих частей трижды прибавили самый внутренний кубик объемом $8d^3$. Следовательно для вычисления эффективного объема нам необходимо вычесть и эту величину: — $8d^3$. Следовательно объем эффективного импульса:

$$\frac{4}{3} \pi p_\mu^3 - 6 \pi p_\mu^2 + 24 p_\mu d^2 - 8 \frac{d^4}{p_\mu} + (2\pi - 8) d^3.$$

Выражаю свою благодарность господину профессору Пал Гомбаш, который своими указаниями и советами способствовал завершению этой работы.

KORREKTION IN DER FERMISCHEN KINETISCHEN ENERGIEFORMEL

R. PAUNZ

(Zusammenfassung)

Die mittlere kinetische Energie eines freien, in einem Kasten eingesperrten Elektronengases (bei sehr tiefen Temperaturen) wird auf zwei Wegen ermittelt: a) Fermische Statistik b) Quantenmechanisches Kastenmodell. Die Rechnungen führen zu verschiedenen Resultaten. Es wird gezeigt, dass diese Diskrepanz völlig beseitigt werden kann, wenn man berücksichtigt, dass keiner der Impulskomponenten den Wert 0 annehmen kann. Dem originalen Gedankengang folgend erhalten wir Korrektionsglieder in der Fermischen Formel. Die auf Grund der korrigierten kinetischen Energieformel berechneten Werte stimmen mit den quantenmechanischen gut überein.

Theoretisches Physikalisches Institut, Szeged.

ÜBER EINE ERWEITERUNG DER STATISTISCHEN FORMULIERUNG DES BESETZUNGSVERBOTES VOLLBESETZTER ELEKTRONENZUSTÄNDE IN ATOMEN

Von
P. GOMBÁS

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen: 18. X. 1951.)

Die vom Verfasser in einer früheren Arbeit hergeleitete statistische Formulierung des Besetzungsverbotes vollbesetzter Elektronenzustände in Atomen wird wesentlich verfeinert, indem die Elektronen des statistisch behandelten Atomrumpfes nach der Nebenquantenzahl gruppiert werden. Wesentlich ist, dass durch diese neue Formulierung des Besetzungsverbotes ausser Atomrümpfe mit einer äusseren abgeschlossenen (*s, p*)-Elektronenschale auch Atomrümpfe mit einer äusseren *d*-Elektronenschale erfasst werden. Dies ermöglicht eine sehr einfache Berechnung der Energieniveaus, nebst der Alkali- und Erdalkaliatome, auch der Atome Cu, Ag, Au und Zn, Cd, Hg; weiterhin lässt sich auf den neuen Grundlagen neben den Alkali- und Erdalkalimetallen eine sehr einfache Theorie der Edelmetalle und des metallischen Zn, Cd und Hg entwickeln.

In einer früheren Arbeit [1] wurde vom Verfasser gezeigt, dass sich das Paulische Besetzungsverbot der vollbesetzten Elektronenzustände in Atomen von statistischen Grundlagen ausgehend durch ein Abstossungspotential ersetzen lässt, das von der Form

$$F_i = \gamma_0 (\varrho^{2/3} - \varrho_i^{2/3}) \quad (1)$$

ist. Hier bezeichnet ϱ die Elektronendichte der gesamten Rumpfelektronen und ϱ_i die Elektronendichte derjenigen Rumpfelektronen, deren Energie kleiner ist, als bzw. die Energie des $1s$ -, $2p$ -, $3d$ -, . . . Quantenzustandes. γ_0 bedeutet die Konstante

$$\gamma_0 = \frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} e a_0, \quad (2)$$

wo e die positive Elementarladung und a_0 der kleinste Bohrsche Wasserstoffradius ist. Näheres über das Potential F_i findet man in der zitierten Arbeit. Wenn man dieses Zusatzpotential F_i zum elektrostatischen Potential V hinzuhinzuladdiert, so hat man z. B. für die Valenzelektronen eines Atoms keinerlei Orthogonalitätsrelationen in Bezug auf die Rumpfelektronen mehr zu berücksichtigen, wodurch sehr grosse rechnerische Vereinfachungen entstehen. All diese Betrachtungen gelten nur für solche Atome, bei denen der Atomrumpf eine

abgeschlossene Elektronenschale besitzt. Insbesondere zeigt sich, dass die Annahmen hauptsächlich für Atome zutreffen, bei denen die äusserste abgeschlossene Elektronenschale eine (s, p) -Schale ist, d. h. bei denen der Atomrumpf eine edelgasähnliche Struktur hat. Für Atome, bei denen die äusserste abgeschlossene Elektronenschale des Rumpfes eine d -Schale ist, treffen die Ausführungen weniger gut zu und man erhält deshalb mit dem Potential F_i für die Energieniveaus dieser Atome z. B. des Cu-Atoms weniger gute Resultate als für die Alkali- oder Erdalkaliatome. An Hand der weiter unten folgenden Ausführungen zeigt sich nämlich, dass bei einer einheitlichen statistischen Behandlung der s -, p -, d -, ... Elektronen gewisse feinere Züge verwischt werden.

Die Verfeinerung der statistischen Formulierung des Besetzungsverbotes — das das Ziel der vorliegenden Arbeit ist — gestaltet sich nun folgendermassen. Wir ziehen ein Atom in Betracht, das aus einem elektronenreichen Rumpf und z Valenzelektronen besteht. Den Atomrumpf behandeln wir statistisch, d. h. wir teilen das Elektronengas in Teilgebiete vom Volumen dv ein, in denen sich noch eine grosse Anzahl von Elektronen befindet und in denen das elektrostatische Potential konstant ist. Für die Gebiete unmittelbarer Kernnähe und die vom Kern sehr weit entfernten Gebiete trifft dies nicht zu. Denn sehr nahe zum Kern ändert sich das Potential sehr stark mit der Entfernung vom Kern und in sehr grosser Entfernung vom Kern befinden sich nur sehr wenige Elektronen. Da aber diese Gebiete im folgenden keine Rolle spielen, können wir von dieser Schwierigkeit absehen. Wir können daher die Elektronen als ein freies Elektronengas am absoluten Nullpunkt der Temperatur betrachten und das innerhalb der Zelle dv konstante elektrostatische Potential einstweilen vernachlässigen. Wenn wir uns für die Energieverteilung der Elektronen in der Zelle dv interessieren, so können wir uns — da die Energie der Elektronen innerhalb dv vom Ort unabhängig ist — auf die kinetische Energieverteilung, d. h. auf die Verteilung der Elektronen im Impulsraum beschränken.

Der früheren Formulierung des Besetzungsverbotes liegt eine einheitliche statistische Behandlung der Rumpfelektronen zu Grunde, zufolge der sich die in einer Elementarzelle dv befindlichen Elektronen bzw. deren Bildpunkte, im Impulsraum eine Kugel, deren Zentrum der Origo des Impulsraumes ist, voll ausfüllen. Statt dieser einheitlichen statistischen Behandlung der Rumpfelektronen wollen wir nun die Elektronen mit verschiedener Nebenquantenzahl gesondert behandeln. Wir stützen uns hierbei auf einige Resultate einer Arbeit von *Fermi* [2], in welcher *Fermi* die Anzahl der s -, p -, d -, ... Elektronen der Atome in Abhängigkeit von der Ordnungszahl bestimmte. Zur gesonderten statistischen Behandlung der s -, p -, d -, ... Elektronen unterteilen wir den Impulsraum mit einem System von coaxialen Kreiszylinderflächen, — dessen Achse mit dem zum Raumelement dv gezogenen Ortsvektor \mathbf{r} identisch ist (man vgl. hierzu Fig. 1) — in Zylinderschalen in der Weise, dass die aufeinander folgenden Schalen die Bildpunkte der s -, p -, d -, ... Elektro-

nen enthalten. Aus der Arbeit von *Fermi* geht hervor, dass man für die Anzahl der s -, p -, d -, . . . Elektronen im Atom zu einem mit der Erfahrung übereinstimmenden Resultat gelangt, wenn man die Radien der aufeinander fol-

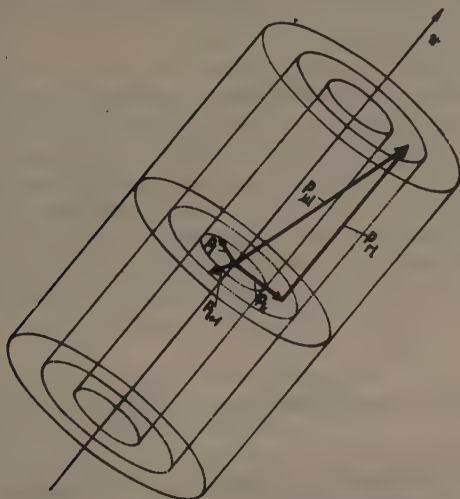


Fig. 1. Zur Aufteilung des Impulsraumes

genden Zylinderquerschnitte folgendermassen festlegt. Wenn wir mit p_ϕ die auf r senkrechte Impulskomponente und mit r den Absolutwert von r bezeichnen, so ergibt sich für den Betrag des Impulsmomentes

$$M_l = r p_\phi. \quad (3)$$

Die Radien p_l der aufeinander folgenden Zylinderquerschnitte werden bei Fermi nun dadurch festgelegt, dass man M_l entsprechend der halbklassischen Betrachtungsweise mit $lh/2\pi$ gleichsetzt, wo h die Plancksche Konstante bezeichnet. Man hat also

$$M_l = r p_l = l \frac{h}{2\pi}, \quad (4)$$

woraus sich für p_l die folgenden Werte ergeben

$$p_l = l \frac{1}{r} \frac{h}{2\pi}. \quad (5)$$

Für $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ erhält man hieraus die Radien der Zylinderquerschnitte; man vgl. hierzu Fig. 2.

Bei dieser Aufteilung des Impulsraumes befinden sich die s -Elektronen innerhalb des Zylinders mit der Mantelfläche, der $l = 1$ entspricht. Die p -, d -, . . . Elektronen befinden sich in aufeinanderfolgenden Zylinderschalen und zwar die p -Elektronen in der Zylinderschale, die durch die Mantelflächen,

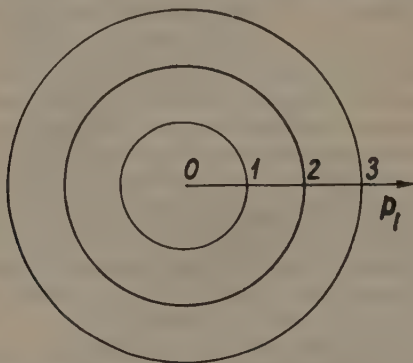


Fig. 2. Zylinderquerschnitte im Impulsraum. Die Zahlen entlang der p_l -Achse geben den Wert von l an

denen $l = 1$ bzw. $l = 2$ entspricht, begrenzt ist; die d -Elektronen in der Zylinderschale, die durch die Mantelflächen, denen $l = 3$ bzw. $l = 2$ entspricht, begrenzt wird, usw. Bei dieser Aufteilung des Impulsraumes ist der Flächeninhalt des Querschnittes der l -ten Zylinderschale

$$f_l = (p_{l+1}^2 - p_l^2) \pi = (2l + 1) \frac{h^2}{4\pi} \frac{1}{r^2}.$$

Das Verhältnis des Flächeninhaltes der aufeinanderfolgenden Zylinderquerschnitte ist daher

$$1 : 3 : 5 : 7 : \dots,$$

d. h. die Flächeninhalte der aufeinanderfolgenden Zylinderquerschnitte stehen im selben Verhältnis zueinander wie die Anzahl der zur selben Hauptquantenzahl gehörenden s -, p -, d -, . . . Elektronen.

Unser nächstes Ziel ist die Berechnung des maximalen Impulses, bzw. der maximalen Energie der s -, p -, d -, . . . Elektronen. Hierzu müssen wir zunächst die azimutale, d. h. auf den Ortsvektor \mathbf{r} senkrechte mittlere Impulskomponente p_k der s -, p -, d -, . . . Elektronen bei dieser statistischen Behandlungsweise bestimmen. Für p_k können wir entsprechend (5) die Form

$$p_k = k \frac{1}{r} \frac{h}{2\pi} \quad (6)$$

ansetzen. Nach der älteren Quantentheorie hätte man für k bei den s -, p -, d -, . . . Elektronen bzw. die Werte 0, 1, 2, . . . zu setzen; in der Wellen-

mechanik hätte man statt k den Ausdruck $[l(l+1)]^{1/2}$ zu setzen. Bei der statistischen Betrachtungsweise wäre aber beides falsch, da die s -, p -, d -, . . . Elektronen bei dieser Betrachtungsweise im Impulsraum einen Raumteil von endlicher Impulsbreite erfüllen und man bei der eben genannten ersten Wahl der k -Werte ($k = 0, 1, 2, \dots$) jeweils den kleinsten Impulswert des Impulsintervalls wählen würde, und bei der zweiten Wahl der k -Werte ($k = [l(l+1)]^{1/2}$) im Falle der am meisten interessierenden s -Elektronen ebenfalls den kleinsten Impulswert des Impulsintervalls erhalten würde, und auch die Impulswerte der p -, d -, . . . Elektronen zu klein ausfielen. Man muss daher einen entsprechend gewählten Mittelwert der Impulsintervalle festlegen. Fermi ist so vorgegangen, dass er für k bei den s -, p -, d -, . . . Elektronen der Reihe nach die Werte $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ wählte. Wir wollen genauer so verfahren, dass wir k aus dem Mittelwert des azimuthalen Anteils der kinetischen Energie der Elektronen der l -ten Zylinderschale bestimmen, indem wir $p_k^2/(2m)$ diesem Mittelwert gleichsetzen. Wir setzen also

$$\frac{1}{2m} p_k^2 = \frac{1}{n_l} \int \frac{p_\varphi^2}{2m} dQ, \quad (7)$$

wo n_l die Anzahl der Elektronen im hervorgehobenen Volumenelement bezeichnet, deren Bildpunkte in die l -te Zylinderschale fallen, und dQ die Anzahl der Quantenzustände derjenigen Elektronen in dv ist, deren azimuthaler Impuls zwischen p_φ und $p_\varphi + dp_\varphi$ und radialer Impuls zwischen p_r und $p_r + dp_r$ fällt; die Integration hat man auf alle besetzten Zustände in der l -ten Zylinderschale auszudehnen. Mit Rücksicht darauf, dass

$$dQ = \frac{2}{h^3} 2\pi p_\varphi dp_\varphi dp_r dv$$

ist, folgt

$$\frac{1}{2m} p_k^2 = \frac{2\pi dv}{n_l m h^3} \int_{p_l}^{p_{l+1}} \int_{-p_r}^{p_r} p_\varphi^2 dp_\varphi dp_r = \frac{\pi dv}{n_l m h^3} (p_{l+1}^4 - p_l^4) p_{r,l}, \quad (8)$$

wo $p_{r,l}$ der maximale radiale Impuls der Elektronen in der l -ten Zylinderschale, d. h. $2p_r$, die Höhe der Zylinderschale bezeichnet. Der Ausdruck $2(p_{l+1}^2 - p_l^2)\pi p_{r,l}$ stellt gerade das Volumen der l -ten Zylinderschale im Impulsraum dar. Da weiterhin der Zusammenhang

$$2(p_{l+1}^2 - p_l^2)\pi p_{r,l} dv = n_l \frac{h^3}{2} \quad (9)$$

besteht, folgt aus (8)

$$\frac{1}{2m} p_k^2 = \frac{1}{2m} \frac{1}{2} (p_{l+1}^2 + p_l^2) \quad (10)$$

p_k^2 ist also der algebraische Mittelwert von p_l^2 und p_{l+1}^2 . Nach Einsetzen der Ausdrücke p_l , p_{l+1} und p_k entsprechend (5) und (6) erhält man für k den Wert

$$k = \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right]^{1/2} \quad (11)$$

Für die s -, p -, d -, ... Elektronen ergibt sich also für k bzw. $(1/2)^{1/2} = 0,707 \dots$, $(5/2)^{1/2} = 1,58 \dots$, $(13/2)^{1/2} = 2,55 \dots$, ... Wie zu sehen ist, nähern sich die so festgelegten k -Werte mit wachsendem l sehr rasch den von Fermi gewählten k -Werten, bzw. dem von der Wellenmechanik geforderten Wert $[l(l+1)]^{1/2}$. Eine grössere Abweichung gibt es nur für s -Elektronen, d. h. für $l=0$. In diesem Fall haben wir $k = (1/2)^{1/2} = 0,707 \dots$, während Fermi $k = 1/2$ setzt und der wellenmechanische Wert $k = 0$ beträgt. Der wellenmechanische Wert $k = 0$, wäre natürlich in unserem Fall viel zu klein, da bei der zugrunde liegenden Einteilung des Impulsraumes den s -Elektronen das Intervall

$$0 < k < 1$$

entspricht, d. h. $k = 0$ die untere Grenze des Intervalls darstellt. Aber es ist auch der von Fermi gewählte Wert $k = 1/2$ zu klein, da der Querschnitt des Zylinders im Impulsraum mit p_k quadratisch wächst und $k^2 = 1/4$ in dem für k^2 gültigen Intervall

$$0 < k^2 < 1$$

noch weit unterhalb des Mittelpunktes $k^2 = 1/2$ liegt. Eben diese quadratische Abhängigkeit des Impulsraumvolumens von p_k gibt die physikalische Grundlage für die weiter oben getroffene Wahl von p_k , aus der als Mittelwert gerade der Mittelpunkt des jeweiligen Intervalles für k^2 , also im Falle von s -Elektronen $k^2 = 1/2$ folgt.

Unser nächstes Ziel ist die Bestimmung des maximalen radialen Impulses bzw. des maximalen Impulses der s -, p -, d -, ... Elektronen. Dies geschieht mit Hilfe des Energieminimumprinzips und des Pauli-Prinzips, wonach die Bildpunkte der Elektronen in den einzelnen Zylinderschalen diejenigen Impulsraumzellen besetzen, denen die tiefste Energie entspricht und zwar in der Weise, dass im Phasenraum in einer Zelle vom Volumen h^3 sich höchstens die Bildpunkte zweier Elektronen befinden können. Wenn wir das herausgegriffene Raumvolumen in der Elektronenwolke des Atoms mit dv , die in diesem befindlichen Elektronen mit der Nebenquantenzahl l mit dN_l und das entsprechende Impulsraumvolumen, d. h. das Volumen der l -ten Zylinderschale mit $d\omega_l$ bezeichnen, so ergibt sich hieraus

$$d\omega_l dv = \frac{h^3}{2} dN_l. \quad (12)$$

Das Impulsraumvolumen $d\omega_l$ ist das Volumen einer Zylinderschale. Wenn wir die radiale Impulskomponente mit p_{rl} bezeichnen (man vgl. Fig. 1), so ergibt sich für $d\omega_l$ der folgende Ausdruck

$$d\omega_l = 2(p_{l+1}^2 - p_l^2) \pi p_{rl} = (2l+1) \frac{h^2}{2\pi} \frac{p_{rl}}{r^3}. \quad (13)$$

Durch Einsetzen dieses Ausdruckes in (12) erhält man für

$$p_{rl} = \frac{h\pi}{2l+1} r^2 \varrho_l = \frac{h}{4(2l+1)} D_l, \quad (14)$$

wo

$$\varrho_l = \frac{dN_l}{dv} \quad (15)$$

die räumliche Dichte der Elektronen mit der Nebenquantenzahl l bezeichnet und

$$D_l = 4\pi r^2 \varrho_l \quad (16)$$

die radiale Dichte dieser Elektronen ist.

Nachdem wir p_k auf die weiter oben angegebene Weise festgelegt haben, können wir nun auch die maximale Energie $u_{\mu l}$ der Elektronen mit der Nebenquantenzahl l bestimmen. Wenn wir den Betrag des maximalen Impulses in der l -ten Zylinderschale mit $p_{\mu l}$ bezeichnen (man vgl. Fig. 1), so ergibt sich

$$U_{\mu l} = \frac{1}{2m} p_{\mu l}^2 = \frac{1}{2m} (p_{rl}^2 + p_k^2) = \frac{h^2}{32m(2l+1)^2} D_l^2 + \frac{h^2}{8\pi^2 m} \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{1}{r^2}, \quad (17)$$

oder wenn man atomare Einheiten einführt

$$U_{\mu l} = \frac{\pi^2}{8(2l+1)^2} e^2 a_0 D_l^2 + \frac{1}{2} e^2 a_0 \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{4} e^2 a_0 \frac{1}{r^2}. \quad (18)$$

Dies ist der *statistische* Ausdruck der maximalen kinetischen Energie eines Elektrons mit der Nebenquantenzahl l . Die Valenzelektronen behandeln wir auf Grund der Wellenmechanik. Der *wellenmechanische* Ausdruck des azimutalen Anteils der kinetischen Energie eines Elektrons ist $\frac{1}{2} e^2 a_0 l(l+1)/r^2$. Wenn man diesen wellenmechanischen Energieanteil — der auch im Ausdruck (18) vorkommt — vom statistischen Energieausdruck (18) abzieht, so erhält man die Energie

$$w_l = \frac{\pi^2}{8(2l+1)^2} e^2 a_0 D_l^2 + \frac{1}{4} e^2 a_0 \frac{1}{r^2}. \quad (19)$$

Dies ist die Mindestenergie, die man einem im Sinne der Wellenmechanik behandelten Elektron mit der Nebenquantenzahl l zuführen muss, um es im Volu-

menelement dv unterbringen zu können. Da w_l eine nur von den Koordinaten abhängige Funktion ist, kann man für w_l auch

$$w_l = -eG_l \quad (20)$$

$$G_l = -\frac{\pi^2}{8(2l+1)^2} ea_0 D_l^2 - \frac{1}{4} ea_0 \frac{1}{r^2} \quad (21)$$

setzen und G_l als ein Potential auffassen.

Durch ganz ähnliche Überlegungen, wie in der zitierten Arbeit des Verfassers, kommen wir jetzt zu dem Schluss, dass man für ein Valenzelektron mit der Nebenquantenzahl l in einem Atom mit einem abgeschlossenen Rumpf das Besetzungsverbot der von den Rumpfelektronen vollbesetzten Quantenzustände dadurch in Betracht ziehen kann, dass man statt dem elektrostatischen Potential V das modifizierte Potential

$$W_l = V + G_l \quad (22)$$

eingführt. Mit diesem gestaltet sich die Schrödingersche Gleichung zur Bestimmung der Eigenfunktionen und der Energieniveaus der z Valenzelektronen folgendermassen

$$\frac{1}{2} e^2 a_0 \sum_{i=1}^z \Delta_i \psi + \left[E + \sum_{i=1}^z e W_{li}(r_i) \right] \psi = 0, \quad (23)$$

wo ψ die Wellenfunktion, E den Energieparameter der z Valenzelektronen, Δ_i den in den Koordinaten des i -ten Elektrons ausgedrückten Laplaceschen Operator und r_i die Entfernung des i -ten Elektrons vom Kern bezeichnet.

Durch die Einführung des modifizierten Potentials G_l wird man bei der Berechnung des Grundzustandes der Valenzelektronen jeder Besetzungsvorschrift bezüglich der Valenzelektronen enthoben; man kann also in dieser Beziehung so verfahren, als ob die Rumpfelektronen gar nicht existierten, d. h. die Eigenfunktion der Valenzelektronen hat jetzt keinerlei Orthogonalitätsbedingung zu genügen. Für angeregte Zustände der Valenzelektronen bestehen aber auch jetzt für die Eigenfunktion der Valenzelektronen in Bezug auf die Eigenfunktionen der energetisch tiefer liegenden Valenzelektronenzustände die üblichen Orthogonalitätsbedingungen.

Geradeso wie in den zitierten Arbeiten, brauchen wir an der statistischen Behandlung des Rumpfes nicht festhalten, sondern können den Rumpf wellenmechanisch z. B. nach *Hartree* oder *Hartree* und *Fock* behandeln. Für D_l hat man in G_l auch dann die radiale Elektronendichte all derjenigen Rumpfelektronen zu setzen, die einen Quantenzustand mit der Nebenquantenzahl l besetzen. Bei der Berechnung des $4p$ -Zustandes des Valenzelektrons (d. h. des tiefsten p -Valenzelektronenzustandes) im K -Atom ist z. B. D_l die Summe der radialen Dichten der sechs $2p$ - und sechs $3p$ -Rumpfelektronen des K -Rumpfes. Der Ausdruck für D_l bleibt unverändert bei der Berechnung eines angeregten p -

Zustandes, z. B. des $5p$ -Zustandes des Valenzelektrons, nur hat man Sorge zu tragen, dass die Eigenfunktion des angeregten p -Zustandes auf die der tiefer liegenden p -Zustände des Valenzelektrons (also bei der Berechnung des $5p$ -Zustandes auf die Eigenfunktion des $4p$ -Zustandes) orthogonal sei. Bei der Berechnung eines d -Zustandes des Valenzelektrons im K -Atom ist $D_l \equiv 0$, da der K^+ -Rumpf keine d -Elektronen besitzt; dasselbe ist auch für einen f^- , g^- , ... Zustand der Fall. In diesen Fällen muss das ganze Zusatzpotential G_l identisch verschwinden.

Hierzu und im allgemeinen bezüglich des Zusatzpotentials G_l ist noch folgendes zu sagen. Da $w_l = -e G_l$ aus $w_{\mu l}$ durch Abzug des nach der Wellenmechanik berechneten azimutalen kinetischen Energieanteils $\frac{1}{2} e^2 a_0 l(l+1)/r^2$ entsteht, sollte man zunächst erwarten, dass G_l nur dem radialen Impuls entsprechende Glieder enthält, d. h., dass in G_l dem azimutalen Impuls entsprechende Glieder nicht vorkommen. Dies ist aber nicht der Fall, da im Ausdruck (21) von G_l das zweite Glied $\frac{1}{4} e a_0 / r^2$ azimutalen Ursprungs ist und zwar aus dem Mittelwert des statistisch berechneten azimutalen Anteils der kinetischen Energie resultiert. Dieses, mit Ausnahme der s -Zustände, relativ kleine Glied ist eine Folge der statistischen Berechnungsweise der kinetischen Energie der Elektronen, das man keinesfalls vernachlässigen kann. Um nun den richtigen Anschluss der statistischen Behandlungsweise an die wellenmechanische herzustellen, hat man folgendes zu beachten. Bei der Berechnung derjenigen Zustände für die $D_l \equiv 0$ ist und naturgemäss das ganze Zusatzpotential verschwinden muss, würde man aus Formel (21) für das Zusatzpotential $G_l = -\frac{1}{4} e a_0 / r^2$ erhalten, was unrichtig ist. Um hier für G_l aus Formel (21) das richtige Resultat zu erhalten, müssen wir folgende ergänzende Festsetzung treffen: das Glied $-\frac{1}{4} e a_0 / r^2$ im Ausdruck von G_l ist für diejenigen Zustände, für die $D_l \equiv 0$ ist, zu streichen.

Das Potential $W_l = V + G_l$ können wir gerade so wie das Potential $\Phi = V + F_l$ zur Berechnung von Atomtermen, weiterhin zur Entwicklung einer Theorie der einfacheren Metalle heranziehen. Dies wollen wir zum Teil in der zweitnächsten Arbeit tun. Hier sei nur so viel gesagt, dass sich bei den Anwendungen das Potential G_l dem Potential F_l bedeutend überlegen zeigt, denn auf Grund des Potentials G_l kann man nicht nur solche Atomprobleme erfolgreich behandeln, bei denen die äusserste Elektronenschale der Atome eine edelgasähnliche abgeschlossene (s, p) -Schale ist, sondern auch solche Probleme, bei denen die äusserste abgeschlossene Elektronenschale der Atome eine abgeschlossene d - oder s -Schale ist. Demzufolge ergibt sich, dass sich auf Grund des G_l -Potentials nicht nur wie mit dem Potential F_l eine mit der Erfahrung sehr gut übereinstimmende Theorie der Alkali- und Erdalkalimetalle, sondern nebst dieser auch eine Theorie der Edelmetalle und der Metalle Zn , Cd und Hg entwickeln lässt, ebenfalls im besten Einklang mit dem empirischen Befund.

Wie aus einem Vergleich des Zusatzpotentials G_i mit dem Zusatzpotential F_i zu sehen ist, sind diese verschiedene Funktionen von r . Dass man trotz dieser Verschiedenheit mit beiden Zusatzpotentialen für Alkalimetalle praktisch dieselbe Gitterenergie und Gitterkonstante erhält, besagt natürlich nur, dass verschiedene Potentiale natürlicherweise zum selben Energieeigenwert führen können. Das Wesentliche an der Sache ist aber, dass sich G_i gerade als solch eine Funktion von r ergibt, die für Alkalimetalle tatsächlich praktisch zum selben mit der Erfahrung übereinstimmenden Eigenwert führt, wie das Zusatzpotential F_i .

Die Durchführung dieser Arbeit, und der beiden nachfolgenden Arbeiten habe ich der aufopfernden Hilfe meiner kürzlich verstorbenen Frau *Ida Gombás* zu verdanken.

LITERATUR

1. *P. Gombás*, ZS. f. Phys. **118**, 164, 1941, weiterhin *P. Gombás* u. *A. Kónya*, Math. u. Naturwiss. Anz. d. Ung. Akad. d. Wiss. **LXI**, 677, 1942. Man vgl. auch *P. Gombás*, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949, S. 150 ff., 206 ff., 303 ff.
2. *E. Fermi*, ZS. f. Phys. **48**, 73, 1928.

НОВАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА ПРИНЦИПА ЗАПОЛНЕНИЯ В СЛУЧАЕ АТОМОВ

П. Гомбаш

Автор в этой работе существенно углубляет и развивает дальше статистическую формулировку принципа заполнения, данную им в одной из прежних работ. Он трактует электроны группируя их по вспомогательным квантовым числам. Существенным результатом является то, что с помощью новой формулировки принципа заполнения можно обсуждать не только такую замкнутую систему атомов, у которой самая внешняя электронная оболочка является оболочкой (s, p) , а также и такие системы, при которых самая внешняя оболочка является оболочкой a . Это обстоятельство делает возможным, чтобы определять простым способом кроме уровней энергии щелочных и щелочно-земельных металлов могли бы также уровни энергии и атомов Cu, Ag, Au , и Zn, Cd, Hg .

Кроме этого, наряду с разработкой теории щелочных и щелочно-земельных металлов становится возможным и изложение теории благородных металлов.

ÜBER EIN STATISTISCHES ATOMMODELL IN WELCHEM DIE ELEKTRONEN NACH DER NEBENQUANTENZAHLE GRUPPIERT SIND

Von
P. GOMBÁS

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT. BUDAPEST

(Eingegangen: 18. X. 1951.)

Das statistische Atommodell wird durch Gruppierung der Elektronen nach der Nebenquantenzahl erweitert. Die zur Bestimmung des Potentialverlaufes bzw. Verlaufes der Elektronendichte dienende Grundgleichung des erweiterten Modells wird durch die Variation der Energie des Atommodells hergeleitet. Es wird gezeigt, dass die Konvergenzschwierigkeit, die bei Hellmann und Fényes auftritt, bei einer konsequenten Durchführung der statistischen Betrachtungsweise wegfällt.

Das statistische Atommodell wurde durch Gruppierung der Elektronen nach der Nebenquantenzahl zuerst von *Hellmann* [1] und später von *Fényes* [2] erweitert. Wir wollen hier zeigen, dass man dieses erweiterte Modell in einer verbesserten Form sehr einfach auf Grund der in der vorangehenden Arbeit gegebenen Ausführungen entwickeln kann. Bezüglich dieser Ausführungen und der Bezeichnungen verweisen wir auf die vorangehende Arbeit und wollen uns hier nicht in Wiederholungen einlassen.

Wir greifen ein Volumen v -des Atoms heraus, in dem sich noch viele Elektronen befinden und in dem das Potential praktisch konstant ist. Die Elektronen in diesem Volumen wollen wir statistisch behandeln und zwar auf Grund der in der vorangehenden Arbeit entwickelten Unterteilung der Impuls-kugel in Zylinderschalen, in denen sich die einzelnen Elektronengruppen mit vorgegebener Nebenquantenzahl befinden. Wir nehmen an, dass im hervor-gehobenen Volumen v die Anzahl der Elektronen mit der Nebenquantenzahl l n_l beträgt. Die Bildungspunkte dieser n_l Elektronen befinden sich in der l -ten Zylinderschale mit den Zylinderradien p_l und p_{l+1} . Unsere Aufgabe ist zunächst die kinetische Energie U_l dieser Elektronen zu berechnen. Diese ergibt sich folgendermassen

$$U_l = \int \frac{1}{2m} p^2 dQ = \int \frac{1}{2m} (p_r^2 + p_\varphi^2) dQ, \quad (1)$$

wo dQ die Anzahl der Quantenzustände derjenigen Elektronen in v bezeichnet, denen ein azimuthaler Impuls zwischen p_φ und $p_\varphi + dp_\varphi$ und ein radialer Im-

puls zwischen p_r und $p_r + dp_r$ zukommt und die Integration über die besetzten Quantenzustände auszuführen ist. Mit dem Ausdruck

$$dQ = \frac{2}{h^3} v 2\pi p_\varphi dp_\varphi dp_r \quad (2)$$

erhält man

$$\begin{aligned} U_l &= \frac{2\pi v}{mh^3} \int_{p_l}^{p_{l+1}} \int_{-p_{rl}}^{p_{rl}} (p_r^2 + p_\varphi^2) p_\varphi dp_\varphi dp_r = \\ &= \frac{2\pi v}{mh^3} \left[\frac{1}{3} (p_{l+1}^3 - p_l^3) p_{rl} + \frac{1}{2} (p_{l+1}^4 - p_l^4) p_{rl} \right], \end{aligned} \quad (3)$$

wo $2p_{rl}$ die Höhe des von den Elektronen beanspruchten Volumens der l -ten Zylinderschale bedeutet. Man vgl. hierzu Fig. 1 der vorangehenden Arbeit. Mit Rücksicht darauf, dass $2(p_{l+1}^2 - p_l^2) \pi p_{rl} = \omega$ das von den Elektronen beanspruchte Impulsvolumen darstellt und daher die Beziehung

$$\frac{2}{h^3} \omega v = n_l \quad (4)$$

besteht, so folgt aus (3)

$$U_l = \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{3} p_{rl}^3 + \frac{1}{2} (p_{l+1}^3 + p_l^3) \right] n_l. \quad (5)$$

Wenn wir hier, gerade so wie in der vorangehenden Arbeit, $\frac{1}{2} (p_l^2 + p_{l+1}^2) = p_k^2$ setzen, so folgt

$$U_l = \frac{1}{2m} \left(\frac{1}{3} p_{rl}^3 + p_k^2 \right) n_l. \quad (6)$$

Wenn wir weiterhin die Dichte der Elektronen mit der Nebenquantenzahl l mit q_l bezeichnen, d.h.

$$\frac{n_l}{v} = q_l \quad (7)$$

setzen, so erhält man mit Hilfe dieses Ausdruckes und mit den in der vorangehenden Arbeit gegebenen Ausdrücken für p_{rl} und p_k nach Einsetzen in (6)

$$U_l = \left\{ \frac{h^2 \pi^2}{6m(2l+1)^2} q_l^3 r^4 + \frac{h^2}{8\pi^2 m} \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{q_l}{r^2} \right\} v. \quad (8)$$

Hieraus ergibt sich für die kinetische Energiedichte der Elektronen mit der

Nebenquantenzahl l nach Einführen von atomaren Einheiten

$$u_l = \frac{U_l}{r} = \frac{2\pi^4}{3(2l+1)^2} e^2 a_0 Q_l^3 r^4 + \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{Q_l}{r^2}. \quad (9)$$

Mit diesem Ausdruck folgt für die gesamte kinetische Energiedichte der Elektronen

$$\sum_l u_l = \sum_l \left\{ \frac{2\pi^4}{3(2l+1)^2} e^2 a_0 Q_l^3 r^4 + \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{Q_l}{r^2} \right\}. \quad (10)$$

Zur Bestimmung des Ausdruckes der Gesamtenergie des Atoms haben wir noch die potentielle Energie zu berechnen. Für das Potential des Kernes V_k und der Elektronenwolke V_e des Atoms hat man die Ausdrücke

$$V_k = \frac{Ze}{r}, \quad V_e = -e \int \frac{Q(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv', \quad (11)$$

wo \mathbf{r} bzw. \mathbf{r}' den Ortsvektor bezeichnet und Q die gesamte Elektronendichte darstellt, d.h. es ist

$$Q = \sum_l Q_l. \quad (12)$$

Mit Hilfe all' dieser Ausdrücke ergibt sich für die Gesamtenergie E des Atoms

$$E = \sum_l \int \left\{ \frac{2\pi^4}{3(2l+1)^2} e^2 a_0 Q_l^3 r^4 + \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{Q_l}{r^2} - \left(V_k + \frac{1}{2} V_e \right) e Q_l \right\} dv. \quad (13)$$

In diesem Energieausdruck fehlt noch die Austausch- und Korrelationsenergie der Elektronen, auf die wir aber hier nicht näher eingehen wollen.

Der Energieausdruck (13) ist ganz analog zu dem von Hellmann und Fényes von Seiten der Wellenmechanik her hergeleiteten Energieausdruck, mit dem einzigen Unterschied, dass bei uns im zweiten Glied im Integranden der Ausdruck $l(l+1) + \frac{1}{2}$ statt $l(l+1)$ steht. Für grosse Werte von l ist dieser Unterschied nicht von Bedeutung, für kleine Werte von l , so insbesondere für $l=0$, d.h. s-Elektronen, ist jedoch dieser Unterschied wesentlich, da in diesem Falle bei Hellmann und Fényes das zweite Glied im Energieausdruck 0 ist, während dies bei uns nicht der Fall ist. Die Ursache dieses Unterschiedes ist darin zu suchen, dass bei der in der Wellenmechanik fassenden Herleitung von Hellmann und Fényes als mittlerer Beitrag des azimutalen Anteils der kinetischen Energiedichte einfach $\frac{1}{2} e^2 a_0 l(l+1)/r^2$ gesetzt wurde, während, wie aus unseren Ausführungen hervorgeht, der tatsächliche Mittelwert in der l -ten Zylinderschale $\frac{1}{2} e^2 a_0 [l(l+1) + \frac{1}{2}]/r^2$ beträgt. Der azimutale Impuls und somit der azimutale Beitrag der kinetischen Energie darf für s-Elektronen keinesfalls verschwinden.

wie dies bei dem von *Hellmann* und *Fényes* hergeleiteten Glied der Fall ist, denn die Impulsraumzellen haben eine endliche Ausdehnung, demzufolge ein von 0 verschiedener Mittelwert resultieren muss.

Alles Weitere bezüglich der Bestimmung der Elektronendichte verläuft ganz analog zu *Hellmann*. Wenn wir die Gesamtzahl der Elektronen des Atoms mit der Nebenquantenzahl l mit N_l bezeichnen, so bestehen die folgenden Bedingungsgleichungen

$$\int \varrho_l e dv = N_l e. \quad (14)$$

$(l = 0, 1, 2, \dots)$

Wenn wir weiterhin die Anzahl aller Elektronen des Atoms mit N bezeichnen, so muss

$$\sum_l N_l = N \quad (15)$$

sein.

Die Bedingungsgleichungen (14) kann man durch Einführen von Lagrangeschen Multiplikatoren V_l in Betracht ziehen und gelangt zur Bestimmung von ϱ_l zu folgendem Variationsprinzip

$$\delta \sum_l \int \left\{ \frac{2\pi^4}{3(2l+1)^2} e^2 a_0 \varrho_l^2 r^4 + \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{\varrho_l}{r^2} - \left[V_k + \frac{1}{2} V_e - V_l \right] e \varrho_l \right\} dv = 0, \quad (16)$$

wo die Variation hinsichtlich ϱ_l zu erfolgen hat. Hieraus ergibt sich der Zusammenhang

$$\varrho_l = \frac{2l+1}{2^{1/2} \pi^2 e a_0} \frac{1}{r^{5/2}} \left\{ (V - V_l) e r - \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{1}{r} \right\}^{1/2}. \quad (17)$$

Mit Rücksicht auf die Poissonsche Gleichung

$$\Delta V = 4\pi e \sum_l \varrho_l \quad (18)$$

folgt die Bestimmungsgleichung der Potentialverteilung

$$\Delta V = -\frac{2^{3/2}}{\pi a_0} \frac{1}{r^{5/2}} \sum_l (2l+1) \left\{ (V - V_l) e r - \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{1}{r} \right\}^{1/2}. \quad (19)$$

Wenn man sich auf eine kugelsymmetrische Potential- und Dichteverteilung beschränkt, d.h. annimmt, dass V nur von r abhängt, so kann man diese Gleichung auch in folgender Form schreiben

$$\frac{d^2(rV)}{dr^2} = \frac{2^{3/2}}{\pi a_0^{1/2}} \frac{1}{r^{3/2}} \sum_l (2l+1) \left\{ (V - V_l) er - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} e^2 a_0 \left[l(l+1) + \frac{1}{2} \right] \frac{1}{r} \right\}^{1/2} \quad (20)$$

Die Randbedingungen, mit denen diese Gleichung zu lösen ist, sind die folgenden [3]: Erstens folgt aus dem Verhalten des Potentials am Ort des Kernes

$$\lim_{r=0} (rV) = Ze, \quad (21)$$

wo Z die Ordnungszahl des Atoms oder Ions bedeutet. Zweitens ergibt sich aus dem Verhalten des Potentials am Atomrand

$$V(r_0) = \frac{(Z - N)e}{r_0}, \quad (22)$$

wo wir mit r_0 den Grenzradius des Atoms bezeichnen. Drittens erhält man aus dem Verhalten der elektrischen Feldstärke am Atomrand

$$\left(\frac{dV}{dr} \right)_{r=r_0} = - \frac{(Z - N)e}{r_0^2}. \quad (23)$$

Die Lagrangeschen Multiplikatoren V_l sind aus den Nebenbedingungen (14) zu bestimmen.

Aus (17) ist zu sehen, dass die Teildichten ϱ_l nicht bis $r=0$ reichen. Der auf der rechten Seite von (17) in der Klammer $\{ \}$ stehende Ausdruck unter der Wurzel wird nämlich für sehr kleine r negativ, da für sehr kleine r in diesem Ausdruck das Glied $(V - V_l) er$ einer Konstanten zustrebt, während das Glied $-\frac{1}{2} e^2 a_0 [l(l+1) + \frac{1}{2}]/r$ über alle Grenzen wächst. Somit wird also von $r=0$ bis zu einem bestimmten r -Wert, den wir r_l nennen wollen, die rechte Seite von (17) imaginär. Da einer imaginären Elektronendichte keine physikalische Bedeutung zukommt, kann man dem Ausdruck (17) nur von r_l an eine physikalische Bedeutung beimessen. Die Teildichten ϱ_l reichen also nicht bis $r=0$ und zwar auch im Falle von s -Elektronen nicht, da das Glied $\frac{1}{2} e^2 a_0 [l(l+1) + \frac{1}{2}]/r$ auch für s -Elektronen, d.h. $l=0$, nicht verschwindet. Dies ist wesentlich, denn bei einem Verschwinden dieses Gliedes ergeben sich Konvergenzschwierigkeiten, da ϱ_l für $l=0$ im Falle $r \rightarrow 0$ wie $1/r^{5/2}$ unendlich wird. Diese Konvergenzschwierigkeiten treten in dem hier entwickelten Atommodell nicht auf, sie treten jedoch in dem von *Hellmann* und *Fényes* entwickelten Modell auf.

LITERATUR

1. *H. Hellmann*, Acta Physicochimica U. R. S. S. **4**, 225, 1936. Man vgl. auch *P. Gombás*, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen. Springer. Wien. 1949. S. 117 ff.
2. *I. Fényes*, Csillagászati Lapok (Budapest) **7**, 47, 1944; Múzeumi Füzetek (Kolozsvar) **III**, **3**, 1945; **III**, **25**, 1945; Zs. f. Phys. **125**, 336, 1948.
3. Man vgl. z. B. *P. Gombás*, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen. Springer. Wien. 1949. S. 38 ff.

О СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТОМА, В КОТОРОЙ ЭЛЕКТРОНЫ
СГРУППИРОВАНЫ ПО ВСПОМОГАТЕЛЬНОМУ КВАНТОВОМУ ЧИСЛУ

П. Гомбаш

Автор развивает дальше статистическую модель атома группируя электроны по вспомогательному квантовому числу. Из вариации энергии модели атома выводит основное уравнение новой модели, что служит для определения распределения потенциала, или же заряда. В этой новой модели затруднения сходимости, возникшие у Гелльманна и Фенеша, вследствие последовательного статистического обсуждения, отпадают.

ZUR THEORIE DER EDELMETALLE UND DER ALKALIMETALLE

Von
P. GOMBÁS,

(PHYSIKALISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST)

(Eingegangen : 18. X. 1951.)

Auf Grund einer vom Verfasser in einer in dieser Zeitschrift zur selben Zeit erscheinenden Arbeit gegebenen neuen statistischen Formulierung des Besetzungsverbotens vollbesetzter Elektronenzustände in Atomen wird die Theorie der Edelmetalle entwickelt. Insbesondere werden Berechnungen für das metallische Cu durchgeführt, deren Resultate in sehr guter Übereinstimmung mit der Erfahrung stehen. Ausserdem wird gezeigt, dass man auf den neuen Grundlagen auch die Theorie der Alkalimetalle entwickeln kann; die Anwendung der Theorie auf K führt zu Resultaten, die mit der Erfahrung praktisch geadeso gut übereinstimmen wie die Resultate, die man mit einer vom Verfasser in einigen früheren Arbeiten entwickelten Theorie der Alkalimetalle erhält.

Vom Verfasser wurde auf Grund einer Weiterentwicklung der statistischen Theorie des Atoms eine Theorie der Alkali- und Erdalkalimetalle entwickelt [1] mit Hilfe der man die wichtigsten strukturunabhängigen Konstanten und Eigenschaften dieser Metalle einfach berechnen kann. Das Wesentliche in dieser Theorie ist, dass man annimmt, dass sich die Metallelektronen (Valenzelektronen) nicht im elektrostatischen Potentialfeld V der Atomrümpfe, sondern in einem modifizierten Potentialfeld

$$\Phi = V + F \quad (1)$$

befinden, wo das Zusatzpotential F folgende Bedeutung hat

$$F = -\gamma_0 \varrho^{2/3}. \quad (2)$$

Hier ist ϱ die Elektronendichte des Rumpfes und γ_0 die Konstante

$$\gamma_0 = \frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} e a_0; \quad (3)$$

e bezeichnet die positive Elementarladung und a_0 den ersten Bohrschen Wasserstoffradius. Durch Einführen dieses modifizierten Potentials wird man allen Orthogonalitätsforderungen für die Eigenfunktion der Metallelektronen in Bezug auf die Eigenfunktion der Rumpfelektronen enthoben; man hat also in diesem Potential den absolut tiefsten Energiezustand der Metallelektronen zu berechnen. Bezüglich weiterer Details im Zusammenhang mit diesem Potential verweisen wir auf die Originalarbeiten.

Wie schon gesagt ergeben sich auf diesen Grundlagen für die Alkali- und Erdalkalimetalle bei denen die äusserste Elektronenschale der Atomrümpfe eine edelgasähnliche abgeschlossene (s, p) -Elektronenschale ist mit der Erfahrung sehr gut übereinstimmende Resultate. Für die Edelmetalle Cu, Ag, Au, sowie für die Metalle Zn, Cd und Hg, die eine ganz bedeutend tiefere Gitterenergie als die Alkali- bzw. die Erdalkalimetalle besitzen, ergeben sich jedoch Resultate, die mit der Erfahrung bei weitem nicht so gut übereinstimmen, wie diejenigen, die wir für die Alkali- und Erdalkalimetalle erhielten. Der Grund hierfür ist darin zu suchen, dass die äusserste Elektronenschale der Rümpfe dieser Atome nicht wie bei den Alkali- und Erdalkaliatomen eine abgeschlossene edelgasähnliche (s, p) -Elektronenschale, sondern eine abgeschlossene d -Schale ist und für die letzteren das Zusatzpotential weniger gut zutrifft wie für die ersteren. Das statistische Atommodell und somit auch das aus diesem hergeleitete Zusatzpotential F ist nämlich, wie aus der Herleitung folgt, in erster Linie für Atome und Rümpfe gültig, deren äusserste Elektronenschale eine edelgasähnliche abgeschlossene (s, p) -Schale ist. Im Falle von Rümpfen, deren äusserste Elektronenschale eine abgeschlossene d -Schale ist, gibt das Zusatzpotential eine weniger gute Näherung und zwar erhält man im Falle von Atomen mit solchen Rümpfen mit diesem Zusatzpotential zu hohe Energierterme. Dies ist darauf zurückzuführen, dass dem relativ grossen Impulsmoment der d -Elektronen bei der zugrunde gelegten statistischen Betrachtungsweise — bei welcher alle Elektronen auf die gleiche Weise behandelt werden — nicht genügend Rechnung getragen wird. Dies ist sofort aus den Grundannahmen der statistischen Theorie des Atoms zu sehen. Hiernach werden die in einem Volumenelement dv befindlichen Elektronen des Atoms als freies Elektronengas am absoluten Nullpunkt der Temperatur behandelt. Bei einer einheitlichen Behandlungsweise aller Elektronen füllen die Bildpunkte der Elektronen dieses Elektronengases im Impulsraum eine Kugel aus; man vgl. hierzu Fig 1 wo τ den Ortsvektor des in Betracht gezogenen Volumenelementes bezeichnet. Für Atome oder Atomrümpfe, deren äusserste Elektronenschale eine (s, p) -Schale ist — und für das Zusatzpotential F ist gerade diese äusserste Elektronenschale ausschlaggebend — gibt dies eine gute Näherung, für Atome oder Atomrümpfe jedoch, bei welchen die äusserste Elektronenschale eine d -Schale ist, wird die Näherung weniger gut. Die Bildpunkte der d -Elektronen sollten sich nämlich — wie in Fig. 1 schematisch angedeutet ist, — wegen ihres relativ grossen Impulsmomentes von der Achse der Impuls-kugel weit entfernt befinden, während bei der weiter oben zugrunde gelegten globalen Betrachtungsweise der Elektronen dies nicht der Fall ist, denn es werden bei dieser Betrachtungsweise die Bildpunkte der Elektronen unabhängig von ihrem Impulsmoment in der Impuls-kugel gleichmässig verteilt.

Dieser Schwierigkeit kann man abhelfen, indem man die Elektronen mit verschiedenem Impulsmoment, d. h. mit verschiedener azimuthaler Quantenzahl

gesondert in Betracht zieht. Dies wurde in einer zur gleichen Zeit in dieser Zeitschrift (Vol I. Fasc. 3, S. 285) erscheinenden Arbeit des Verfassers durchgeführt und gezeigt, dass man bei einer Gruppierung der Elektronen nach der Nebenquantenzahl l für das Zusatzpotential im Falle von s -Zuständen — und nur diese kommen für die Metalle Cu, Ag, Au, Zn, Cd und Hg in Betracht — folgenden Ausdruck erhält ¹

$$G = -\frac{\pi^2}{8} e a_0 D^2 - \frac{1}{4} e a_0 \frac{1}{r^2}, \quad (4)$$

wo D die radiale Dichte der s -Elektronen des Atomrumpfes ist.

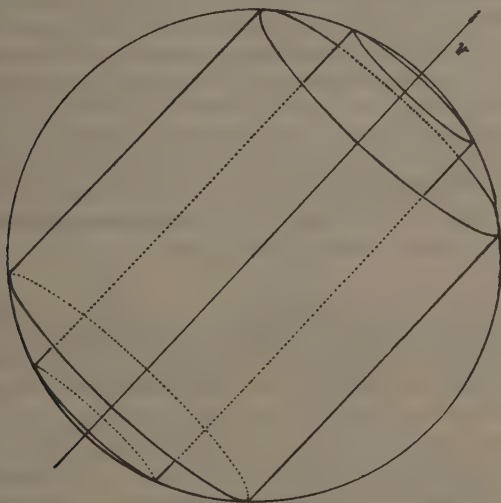


Fig. 1. Zur Aufteilung des Impulsraumes

Die Metalltheorie, die wir auf diesen Grundlagen im folgenden entwickeln wollen, gestaltet sich nun weitgehend analog zu der in den früheren Arbeiten des Verfassers entwickelten Theorie. Bei der Berechnung der Gitterenergie, aus der alles Weitere sehr einfach folgt, kann man sich wieder auf die ein Metall-elektron (Valenzelektron) enthaltende Elementarzelle beschränken, die man wieder durch die Elementarkugel vom gleichen Volumen ersetzen kann. Die Ersetzung der Elementarzelle durch die Elementarkugel, d. h. die Reduktion des Problems auf ein kugelsymmetrisches Problem mit Zentralkräften, ist bei Zugrundelegung des Zusatzpotentials G wesentlich. Die Herleitung dieses

¹ Zur Unterscheidung bezeichnen wir dieses Zusatzpotential statt F mit G .

Potentials gründet sich nämlich auf eine Gruppierung der Elektronen nach der Nebenquantenzahl, das die Zugrundelegung eines kugelsymmetrischen Potentials, d.h. Zentralkräfte voraussetzt. Aus der Herleitung des Potentials G folgt weiterhin, dass dieses Potential bzw. die aus diesem resultierende Abstoßungskraft jeweils nur auf die in der betreffenden Elementarkugel befindlichen Elektronen wirkt und das Potential (4) ausserhalb der betreffenden Elementarkugel identisch gleich 0 zu setzen ist. Auf irgendein hervorgehobenes Elektron wirkt also immer nur dasjenige Zusatzpotential, das in der betreffenden Elementarkugel herrscht. Dies bedeutet einen ganz wesentlichen Unterschied gegenüber dem Potential (2) denn erstens ist dies nicht nur auf kugelsymmetrische Kräfte beschränkt und zweitens wirken bei Zugrundelegung des Potentials (2) auf ein hervorgehobenes Elektron simultan die Potentiale aller Rumpfe im Metall. Allerdings bedeutet wegen des exponentiellen Abfalls des Potentials (2) mit der Entfernung von den einzelnen Kernen die simultane Wirkung der Potentiale (2) aller Rumpfe auf ein hervorgehobenes Elektron auch bei sehr hohen Drucken nur, dass es unter der gleichzeitigen Wirkung der Potentiale der in der unmittelbaren Umgebung des hervorgehobenen Elektrons befindlichen Rumpfe steht: bei Normaldruck reduziert sich die Wirkung für Alkali- und Erdalkalimetalle immer nur auf das Potential eines einzelnen Rumpfes. Dies ändert aber nichts an dem prinzipiellen Unterschied, der zwischen dem Potential (2) und (4) besteht.

Wir gehen nun zur Berechnung der Gitterenergie pro Elementarkugel über. Diese lässt sich ganz analog zu den Alkalimetallen berechnen mit dem Unterschied, dass man jetzt statt dem Zusatzpotential F des Zusatzpotential G zu setzen hat und dass man jetzt — wegen der relativ kleinen Gitterkonstante der Edelmetalle — auch die aus der Überdeckung der Elektronenwolken resultierende gegenseitige Wechselwirkung der Rumpfe zu berücksichtigen hat. Die Gitterenergie U zergliedert sich also auf folgende Energieanteile: die Selbstenergie des Metallelektronengases, die Wechselwirkungsenergie der Metallelektronen mit dem Rumpf und die Wechselwirkungsenergie der Rumpfe.

Die Selbstenergie des Metallelektronengases besteht aus der elektrostatischen Wechselwirkungsenergie der Metallelektronen, E_C der Austauschenergie der Metallelektronen, E_A , der Korrelationsenergie der Metallelektronen, E_W , und der kinetischen Nullpunktsenergie der Metallelektronen E_K .

Die Wechselwirkungsenergie der Metallelektronen mit dem Rumpf enthält folgende Energieanteile: die Coulombsche Wechselwirkungsenergie W_C der punktförmigen Ionenladung mit den Metallelektronen, die aus dem Eintauchen der Metallelektronen in die Elektronenwolke der Ionen resultierende nicht-Coulombsche elektrostatische Energie W_E , die aus der Austauschwechselwirkung der Metallelektronen mit den Rumpfelektronen resultierende Energie W_A und die aus dem Zusatzpotential G resultierende Energie W_K .

Neben diesen Energietermen hat man für Edelmetalle noch die folgenden Energien hinzuzunehmen: erstens die aus der Korrelationswechselwirkung der Metallelektronen mit den Rumpfelektronen resultierende Energie W_W und zweitens die Energie H_S , die aus der Überdeckung der Elektronenwolken benachbarter Ionen resultiert. Dass diese Energien, im Gegensatz zu den Alkalimetallen, bei den Edelmetallen eine Rolle spielen, ist eine Folge des im Verhältnis zu den Alkalimetallen ganz wesentlich kleineren Gitterabstandes. Zuzufolge des relativ kleinen Gitterabstandes findet einerseits bei den Edelmetallen eine Überdeckung der Elektronenwolken benachbarter Ionen statt, woraus H_S resultiert, andererseits ist die Elektronendichte der Metallelektronen sehr gross, demzufolge W_W bei den Edelmetallen eine nicht zu vernachlässigende Rolle spielt. Bei den Alkalimetallen ist H_S gänzlich unbedeutend, weiterhin ist auch W_W klein, es können daher beide Energieterme vernachlässigt werden.

Man erhält also für die Gitterenergie

$$U = E_C + E_A + E_W + E_K + W_C + W_E + W_A + W_W + W_K + H_S. \quad (6)$$

Die Dichte ν des Metallelektronengases kann man auch bei Zugrundelegung der Zusatzpotentials (4) in erster Näherung als konstant ansetzen, d.h. man kann

$$\nu = \frac{3}{4\pi R^3} \quad (7)$$

setzen wo R den Radius der Elementerkugel bezeichnet. Für E_C , E_A , E_W , E_K , W_C und W_E ergeben sich genau dieselben Ausdrücke wie für Alkalimetalle, die wir in der zitierten Arbeit hergeleitet haben und zwar ist

$$E_C = \frac{3e^2}{5} \frac{1}{R}, \quad (8)$$

$$E_A = -\kappa_a \nu^{4/3} \frac{4\pi R^3}{3} = -0,4582 e^2 \frac{1}{R}, \quad (9)$$

$$E_W = -0,0172 \frac{e^2}{a_0} - 0,0577 e^2 \frac{1}{R}, \quad (10)$$

$$E_K = \kappa_k \nu^{5/3} \frac{4\pi R^3}{3} = 1,105 e^2 a_0 \frac{1}{R^2}, \quad (11)$$

$$W_C = - \int_0^R \frac{e}{r} \nu e \, dv = -\frac{3e^2}{2} \frac{1}{R}, \quad (12)$$

$$W_E = - \int \left(V - \frac{e}{r} \right) \nu e \, dv = -\frac{3e}{R^3} \int_0^R \left(V - \frac{e}{r} \right) r^2 \, dr; \quad (13)$$

wo Ω die Elementarkugel, weiterhin κ_k und κ_a die Konstanten

$$\kappa_k = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} e^2 a_0, \quad \kappa_a = \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2 \quad (14)$$

bezeichnet.

Für die Energie W_A können wir für Edelmetalle nicht den für Alkalimetalle durch eine Reihenentwicklung nach Potenzen von ν hergeleiteten Ausdruck gebrauchen. Diese Reihenentwicklung ist bei den Edelmetallen wegen des grossen ν nicht mehr gestattet, so dass man auf den ursprünglichen Ausdruck für W_A zurückgehen muss, nach welchem

$$\begin{aligned} W_A &= -\kappa_a \int_{r < r_g} \left[(\varrho + \nu)^{4/3} - \varrho^{4/3} - \nu^{4/3} \right] dv = \\ &= -\kappa_a \int_{r < r_g} \left[(\varrho + \nu)^{4/3} - \varrho^{4/3} \right] dv + \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \kappa_a r_g^3 \frac{1}{R^4}, \end{aligned} \quad (15)$$

wo r_g einen Grenzradius bezeichnet, bei welchem die Elektronendichte des Rumpfes ϱ mit der Randdichte des Thomas-Fermi-Diracschen Modells

$\varrho_0 = \left(\frac{\kappa_a}{2\kappa_E}\right)^3 = 0,002127/a_0^3$ gleich ist. Für kleinere Dichten kommt nämlich dem Ausdruck (15) mehr keine Realität zu [2].

Bei den Alkalimetallen ist ν im Verhältnis zu ϱ im ganzen Integrationsgebiet klein, man kann daher dort das erste Glied des Integranden nach ν in eine Reihe entwickeln und erhält bei Vernachlässigung der von zweiter und höherer Ordnung kleinen Glieder

$$W_A = -4\kappa_a \frac{1}{R^3} \int_0^{r_g} \varrho^{1/3} r^2 dr + \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \kappa_a r_g^3 \frac{1}{R^4}. \quad (16)$$

Im Falle von Alkalimetallen kann man statt (15) diese einfachere Formel benutzen.

Für W_K erhält man mit dem Ausdruck (4)

$$W_K = - \int_{\Omega} G \nu e dv = \frac{\pi^2}{8} e^2 a_0 \nu \int_{\Omega} D^2 dv + \frac{1}{4} e^2 a_0 \nu \int_{\Omega} \frac{1}{r^2} dv. \quad (17)$$

Beide Integrale auf der rechten Seite sind auf die Elementarkugel Ω auszudehnen. D^2 fällt mit wachsendem r sehr rasch auf 0 ab und ist am Rand der Elementarkugel — in der Umgebung der normalen Gleichgewichtslage — verschwindend klein. Demzufolge kann man das Integral über D^2 statt auf Ω auf den ganzen Raum ausdehnen. Man erhält also

$$W_K = -\frac{3\pi^2}{8} e^2 a_0 \frac{1}{R^3} \int_0^{\infty} D^2 r^2 dr + \frac{3}{4} e^2 a_0 \frac{1}{R^2}. \quad (18)$$

Weiterhin haben wir die Energie W_W zu berechnen. Da es sich bei W_W nur um eine kleine Korrektion handelt, kann man sich bei der Berechnung von W_W mit einer rohen Näherung begnügen und den vom Verfasser angegebenen Ausdruck [2]

$$W_W = 0,130 W_A \quad (19)$$

benutzen. Hiernach ist also in grober Näherung W_W zur Austauschenergie W_A proportional.

Schliesslich müssen wir noch die Energie H_S , d.h. die aus der Überdeckung der Elektronenwolken benachbarter Ionen resultierende Energie berechnen. Dass man nur die benachbarten Ionen in Betracht zu ziehen hat, folgt daraus, dass mit wachsender Entfernung vom Kern die Elektronendichte exponentiell abfällt, demzufolge eine Überdeckung der Elektronenwolken weiter entfernten Ionen nicht stattfindet. H_S kann man auf Grund statistischer Betrachtungen mit einer vom Verfasser hergeleiteten vereinfachten Formel [3] einfach berechnen. Im Falle eines einzelnen Ionenpaares findet man für die aus der Überdeckung der zwei Ionen resultierenden Wechselwirkungsenergie

$$U_S(\delta) = \varphi(\delta) + (2\beta - \alpha) \varrho(\delta). \quad (20)$$

Hier bezeichnet φ das nicht-Coulombsche Potential des Metallions, d.h. es ist

$$\varphi(r) = V(r) - \frac{e}{r}. \quad (21)$$

δ bedeutet den Kernabstand der beiden Ionen; α und β sind die folgenden Konstanten

$$\alpha = 4\pi e \int_0^\infty \varphi r^2 dr, \quad (22)$$

$$\beta = \frac{20\pi}{3} \kappa_k \int_0^\infty \varrho^{2/3} r^2 dr. \quad (23)$$

Die Edelmetalle kristallisieren im flächenzentrierten kubischen Gitter; in welchem jedes Ion 12 unmittelbare Nachbarn im Abstand

$$\delta = 2^{1/2} \left(\frac{2\pi}{3} \right)^{1/2} R \quad (24)$$

besitzt. Um die Ionenpaare in der Gitterenergie nicht doppelt zu zählen, hat man in der Gitterenergie nur die Hälfte der Ionenpaare in Betracht zu ziehen und erhält für H_S

$$H_S(\delta) = 6U_S(\delta). \quad (25)$$

In H_S hätte man noch die Energie zu berücksichtigen, die aus der Austauschwechselwirkung der Rumpfelektronen benachbarter Rumpfe resultiert; diese ist jedoch in der Umgebung der normalen Gleichgewichtslage klein und kann vernachlässigt werden.

Durch Zusammenziehen einiger Glieder lässt sich der Ausdruck der Gitterenergie U der Edelmetalle in der Form

$$U = A_0 + \frac{A_1}{R} + \frac{A_2}{R^2} + \frac{A_3}{R^3} + W_A + W_W + H_S \quad (26)$$

darstellen, wo die Konstanten A_0, A_1, A_2, A_3 die folgenden Werte besitzen

$$A_0 = -0,0172 \frac{e^2}{a_0}, \quad (27)$$

$$A_1 = \left(\frac{3}{5} - \frac{3}{2} - 0,4582 - 0,0577 \right) e^2 = -1,4159 e^2, \quad (28)$$

$$A_2 = \left(1,105 + \frac{3}{4} \right) e^2 a_0 = 1,855 e^2 a_0, \quad (29)$$

$$A_3 = 3e^2 (J_K - J_E); \quad (30)$$

hier sind J_K und J_E die folgenden Integrale

$$J_K = \frac{\pi^2}{8} a_0 \int_0^\infty D^2 r^2 dr, \quad J_E = \frac{1}{e} \int_0^\infty \left(V - \frac{e}{r} \right) r^2 dr = 4\pi e^2 \alpha. \quad (31)$$

Für W_A, W_W und H_S sind für Edelmetalle die Ausdrücke (15), (19) bzw. (25) einzusetzen.

Berechnungen auf diesen Grundlagen wurden für Cu durchgeführt und zwar mit der Dichte- und Potentialverteilung des self-consistent field, das von D. R. Hartree und W. Hartree [4] mit Berücksichtigung des Elektronenaustausches bestimmt wurde. Für r_s ergibt sich mit dieser Verteilung der Wert $r_s = 2,875 a_0$; weiterhin erhält man $J_E = 3,09 a_0^2$ und $J_K = 4,06 a_0^2$, sowie $\alpha = 38,8 e a_0^2$ und $\beta = 112,1 e a_0^2$. Mit Hilfe dieser Daten kann man die Gitterenergie für verschiedene Werte der Gitterkonstante einfach berechnen. Die Gitterkonstante in der stabilen Gleichgewichtslage ist derjenige Wert der Gitterkonstante, für welchen die Gitterenergie ein Minimum aufweist. Wie die Berechnungen zeigen, sind auch für Cu die wesentlichsten Anteile der Anziehungsenergie W_C, E_A, W_E, W_A ; einen keinesfalls zu vernachlässigbaren Anteil zur Anziehung liefern die Energien E_W und W_W . Dem Betrage nach den grössten Anteil zur Abstossung liefert der Energieanteil W_K , neben dieser Abstossungsenergie sind aber auch die übrigen drei Abstossungsterme E_C, E_K und H_S wesent-

lich. Im Vergleich zu den Alkalimetallen vollkommen neu ist, dass bei den Edelmetallen auch die Energie H_S eine wesentliche Rolle spielt. Die einzelnen Energieteile der Formel (26) und die Gitterenergie selbst als Funktion von R sind in der Tabelle 1 dargestellt. Fig. 2 zeigt graphisch den Verlauf von U als Funktion von R .

TABELLE I.

Die Gitterenergie und die Anteile der Gitterenergie als Funktion von R
 R in a_0 -Einheiten, die Energien in e^2/a_0 -Einheiten.

R	2,00	2,25	2,50	2,60	2,75	3,00	3,20
A_0	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172
$\frac{A_1}{R}$	-0,7080	-0,6293	-0,5664	-0,5446	-0,5149	-0,4720	-0,4425
$\frac{A_2}{R^2}$	0,4638	0,3664	0,2968	0,2745	0,2453	0,2061	0,1812
$\frac{A_3}{R^3}$	0,3638	0,2555	0,1862	0,1656	0,1399	0,1078	0,0888
W_A	-0,4676	-0,3483	-0,2678	-0,2456	-0,2129	-0,1700	-0,1431
W_W	-0,0608	-0,0453	-0,0348	-0,0319	-0,0277	-0,0221	-0,0186
H_S	0,2810	0,0848	0,0265	0,0172	0,0088	0,0029	0,0010
U	-0,1450	-0,3334	-0,3767	-0,3820	-0,3787	-0,3645	-0,3504

Wir haben nun das Minimum der Gitterenergie, das wir mit U_0 bezeichnen, und den entsprechenden R -Wert, für den wir die Bezeichnung R_0 einführen, festzustellen. Aus den Daten der Tabelle 1 und einer graphischen Darstellung der Funktion $U(R)$ ergibt sich

$$R_0 = 2,60 a_0 = 1,38 \text{ \AA} \quad (32)$$

und

$$U_0 = -0,3820 \frac{e^2}{a_0} = -10,4 \text{ eV.} \quad (33)$$

Weiterhin erhält man für die Sublimationsenergie S aus dem Zusammenhang

$$|U_0| = J + S, \quad (34)$$

wo J die Ionisierungsenergie des freien Cu-Atoms bezeichnet

$$S = |U_0| - J. \quad (35)$$

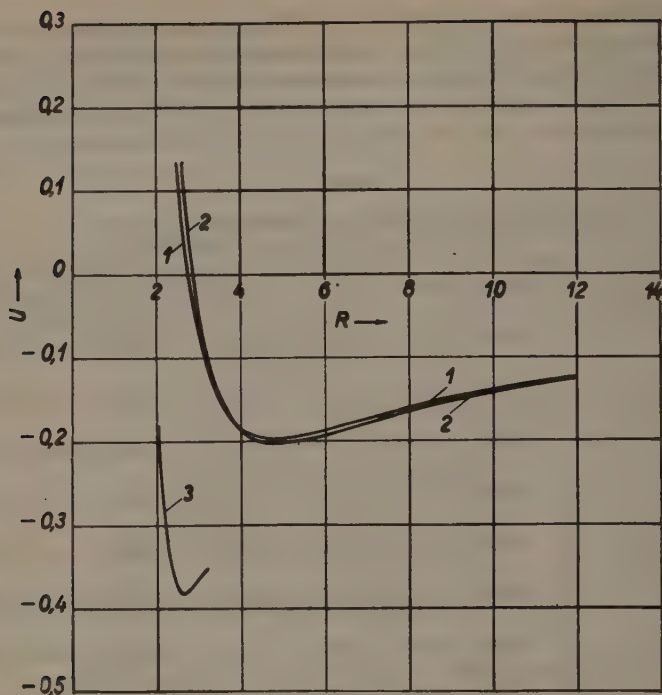


Fig. 2. Die Gitterenergie für K und Cu als Funktion von R

- 1.: $U(R)$ für K mit dem Zusatzpotential F berechnet.
- 2.: $U(R)$ für K mit dem Zusatzpotential G berechnet.
- 3.: $U(R)$ für Cu mit dem Zusatzpotential G berechnet.

Wenn man für J den empirischen Wert [5]

$$J = 7,7 \text{ eV} \quad (36)$$

einsetzt, so folgt

$$S = 2,7 \text{ eV.} \quad (37)$$

Die entsprechenden empirischen Werte sind [6]

$$R_0 = 2,66 a_0 = 1,44 \text{ \AA}, \quad U_0 = -11,0 \text{ eV}, \quad S = 3,3 \text{ eV.} \quad (38)$$

Wie zu sehen ist, stimmen die theoretischen Werte mit diesen sehr befriedigend überein. Besonders gut ist die Übereinstimmung für R_0 und U_0 . Für die Sublimationsenergie S wird der relative Fehler naturgemäss grösser, da sich S als

die Differenz der rund zwei- bis dreimal grösseren Energien $|U_0|$ und J ergibt, wodurch ein kleiner Fehler in $|U_0|$ im Verhältnis zu S stark vergrößert erscheint. Der besseren Übersicht halber haben wir die Resultate für Cu, sowie einige Resultate für K zusammen mit den empirischen in der Tabelle 2 zusammengestellt.

Wir möchten noch darauf hinweisen, dass die Energie H_S , wie aus der Tabelle 1 zu sehen ist, für Edelmetalle eine ganz wesentliche Rolle spielt. Wie man aus der Tabelle sieht, würde sich nämlich für R_0 ohne H_S ein viel zu kleiner Wert ergeben. Ohne die Energie H_S würde die Gitterenergie ihren tiefsten Wert in der Nähe von $R = 2,0 a_0$ annehmen.

Als wesentlich erweist sich bei diesen Berechnungen für Cu, dass man für das Cu^+ -Ion eine möglichst sehr genaue Elektronen- und Potentialverteilung zugrunde legt. Wir wählten die zur Zeit (abgesehen von der hier belanglosen relativistischen Korrektur) genaueste Verteilung und zwar die mit Berücksichtigung des Elektronenaustausches bestimmte sogenannte Hartree-Focksche Verteilung des self-consistent field. Wenn man nämlich die weniger genaue sogenannte Hartree-sche Verteilung des self-consistent field, die ohne Berücksichtigung des Elektronenaustausches bestimmt wird, zugrunde legt, so erhält man nicht so gute Resultate und zwar ergibt sich eine etwas zu kleine Gitterkonstante, d.h. ein etwas zu kleiner Wert für R_0 und ein etwas zu tiefer Wert für die Gitterenergie. Dies ist darauf zurückzuführen, dass mit der weniger genauen Hartreeschen Verteilung der für die Abstossungsenergie sehr wesentliche Koeffizient $A_3 = 3e^2(J_K - J_E)$ ganz bedeutend kleiner ausfällt, als mit der Hartree-Fockschen Verteilung. Während sich nämlich mit der Hartree-Fockschen Verteilung $A_3 = 2,91 e^2 a_0^2$ ergibt, erhält man mit der Hartreeschen Verteilung nur $A_3 = 0,57 e^2 a_0^2$. Dieses Herabsinken des Wertes von A_3 auf rund $\frac{1}{5}$ desjenigen Wertes, welchen man mit der Hartree-Fockschen Verteilung erhält, verursacht den zu kleinen Wert von R_0 und den zu tiefen Wert der Gitterenergie. Der Umstand, dass bei Zugrundelegung der im Verhältnis zur Hartree-Fockschen Verteilung weiter auslaufenden Hartreeschen Verteilung die Abstossungsenergie H_S stark anwächst, vermag den Wert von R_0 und U_0 nicht genügend verbessern, denn dieses Anwachsen der Abstossungsenergie H_S wird in hohem Masse durch das Anwachsen des Betrages der Energie W_A kompensiert.

Die hier entwickelte Theorie kann man auch auf Alkalimetalle anwenden, deren Theorie, wie eingangs schon erwähnt wurde, schon früher vom Verfasser auf Grund des Zusatzpotentials F entwickelt wurde [1] und zu sehr guten Resultaten führte. Die Anwendung der Theorie auf die Alkalimetalle soll hier am Beispiel des metallischen Kaliums gezeigt werden.

Für Alkalimetalle lässt sich der Ausdruck der Gitterenergie stark vereinfachen. Erstens ist nämlich bei den Alkalimetallen die Dichte der Metall-

elektronen bedeutend kleiner, als bei den Edelmetallen, so dass man im Ausdruck von W_A die schon weiter oben erwähnte Reihenentwicklung ohne weiteres durchführen kann, wodurch grosse Vereinfachungen entstehen und zweitens kann man wegen der grossen Entfernung der Alkaliionen im Gitter die Wechselwirkung der Rümpfe vernachlässigen, d.h. H_S streichen. Weiterhin kann man bei den Alkalimetallen auch W_W vernachlässigen.

Für W_A ergibt sich jetzt nach (16)

$$W_A = -3e^2 J_A \frac{1}{R^3} + \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \kappa_a r_g^3 \frac{1}{R^4}, \quad (39)$$

wo J_A das folgende Integral bezeichnet

$$J_A = \frac{4\kappa_a}{3e^2} \int_0^{r_g^{1/3}} \varrho r^3 dr. \quad (40)$$

Mit diesem Ausdruck von W_A lässt sich nun U in folgender Form darstellen

$$U = A_0 + \frac{A_1}{R} + \frac{A_2}{R^2} + \frac{A_3}{R^3} + \frac{A_4}{R^4}. \quad (41)$$

Hier haben die Koeffizienten A_0, A_1, A_2 dieselbe Bedeutung wie auf S. 308, der Koeffizient A_3 ist jedoch abgeändert und bedeutet jetzt den folgenden Ausdruck

$$A_3 = 3e^2 (J_K - J_E - J_A), \quad (42)$$

wo für J_K und J_E wieder die Ausdrücke (31) einzusetzen sind und J_A durch (40) definiert ist. A_4/R^4 ist das zweite Glied auf der rechten Seite im Ausdruck (39); man erhält also für A_4

$$A_4 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \kappa_a r_g^3. \quad (43)$$

Wenn man den Ausdruck (41) der Gitterenergie mit dem Ausdruck vergleicht, der vom Verfasser in den eingangs zitierten Arbeiten auf Grund des Zusatzpotentials F für Alkalimetalle hergeleitet wurde, so ergibt sich formal eine völlige Übereinstimmung. Tatsächlich sind aber nur die Koeffizienten A_0, A_1 und A_4 dieselben wie in dem früher für Alkalimetalle hergeleiteten Energieausdruck, die Koeffizienten A_2 und A_3 sind jedoch abgeändert. Diese Änderung ist ausschliesslich eine Folge dessen, dass im neuen Energieausdruck das Glied W_K durch einen vollkommen anderen Ausdruck dargestellt wird, wie im früheren dem Umstand entsprechend, dass jetzt das Zusatzpotential statt F durch G dargestellt wird. Während in der früher entwickelten Theorie W_K zu $1/R^3$ pro-

portional war und folgende Gestalt hatte

$$W_K = 3e^2 J_K \frac{1}{R^3} \quad \text{mit} \quad J_K = \frac{\gamma_0}{e} \int_0^\infty \varrho^{2/3} r^2 dr, \quad (44)$$

ist jetzt

$$W_K = 3e^2 J_K \frac{1}{R^3} + \frac{3}{4} e^2 a_0 \frac{1}{R^2} \quad \text{mit} \quad J_K = \frac{\pi^2}{8} a_0 \int_0^\infty D^2 r^2 dr. \quad (45)$$

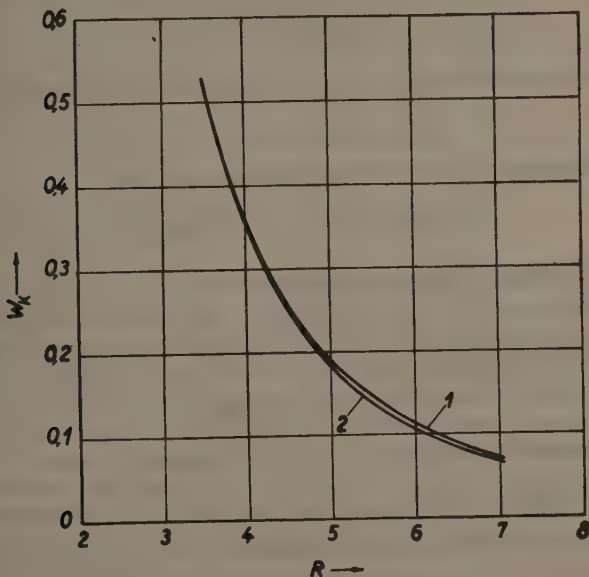


Fig. 3. W_K als Funktion von R für K.

- 1.: $W_K(R)$ mit F berechnet.
- 2.: $W_K(R)$ mit G berechnet.

Es besteht also jetzt W_K aus zwei Gliedern, von denen das eine zu $1/R^3$ und das andere zu $1/R^2$ proportional ist; weiterhin hat J_K jetzt eine vollkommen andere Bedeutung als im früheren Ausdruck. Es ist interessant, dass in der Umgebung der Gleichgewichtslage beide Ausdrücke der Energie W_K fast denselben Wert haben und als Funktion von R praktisch denselben Verlauf zeigen (man vgl. hierzu Fig. 3). Diesem Umstand ist es zuzuschreiben, dass man mit dem neuen Energieausdruck für die Alkalimetalle praktisch dieselben Resultate erhält wie mit dem früher hergeleiteten.

Wir kommen nun auf die Berechnungen für K zu sprechen, die wir auf Grund der Elektronen- und Potentialverteilung des self-consistent field

durchgeführt haben, die von D. R. Hartree und W. Hartree mit Berücksichtigung des Elektronenaustausches bestimmt wurde [7]. Für r_g erhält man den Wert $r_g = 3,08 a_0$. Für die Integrale J_K , J_E und J_A ergibt sich

$$J_K = 6,66a_0^2, \quad J_E = 3,24a_0^2, \quad J_A = 3,02a_0^2. \quad (46)$$

Den Wert von R in der Gleichgewichtslage erhält man als Wurzel der Gleichung

$$\frac{dU}{dR} = 0. \quad (47)$$

Diese Gleichung ist vom dritten Grad und liefert für R_0 den Wert

$$R_0 = 4,80a_0 = 2,54 \text{ \AA}. \quad (48)$$

Für die Gitterenergie in der Gleichgewichtslage ergibt sich

$$U_0 = -0,1956 \frac{e^2}{a_0} = -5,34 \text{ eV}. \quad (49)$$

Mit dem empirischen Wert der Ionisierungsenergie

$$J = 4,34 \text{ eV}$$

folgt für die Sublimationsenergie

$$S = |U_0| - J = 1,00 \text{ eV}.$$

Die entsprechenden empirischen Werte sind [8]

$$R_0 = 4,88a_0 = 2,58 \text{ \AA}, \quad U_0 = -5,47 \text{ eV}, \quad S = 1,15 \text{ eV}.$$

Wie zu sehen ist, stimmen die theoretischen Werte mit diesen sehr gut überein.

Die Resultate, die man mit der auf Grund des Zusatzpotentials F entwickelten Theorie erhält, sind die folgenden [1]

$$R_0 = 4,74a_0 = 2,51 \text{ \AA}, \quad U_0 = -5,51 \text{ eV}, \quad S = 1,17 \text{ eV}.$$

R_0 und U_0 stimmen mit den hier erhaltenen entsprechenden Werten gut überein, für S ist die Abweichung etwas grösser, was aber verständlich ist, wenn man beachtet, dass S die Differenz der rund viermal grösseren Energien $|U_0|$ und J ist und somit eine kleine Abweichung in U_0 im Verhältnis zu S stark vergrössert in Erscheinung tritt.

Der hier auf Grund des Zusatzpotentials G hergeleitete Ausdruck der Gitterenergie des Kaliums ist zusammen mit dem auf Grund des Zusatzpotentials F hergeleiteten Ausdruck der Gitterenergie als Funktion von R in Fig. 2 dargestellt.

Ein Vergleich des Verlaufes der Gitterenergie für K mit dem von Cu in Fig. 2 zeigt, dass in der Gleichgewichtslage $U(R)$ für Cu eine ganz bedeutend

grössere Krümmung besitzt als für K, woraus die im Verhältnis zu K bedeutend kleinere Kompressibilität des Cu resultiert. Wir kommen hierauf in einer später zu veröffentlichenden Arbeit zu sprechen.

Zur besseren Übersicht haben wir die Resultate für K, sowie die Resultate für Cu zusammen mit den empirischen in der Tabelle 2 zusammengestellt.

TABELLE 2.

Theoretische und experimentelle Resultate für Cu und K
 R_0 in 10^{-8} cm, die Energien in eV-Einheiten.

	R_0	U_0	S
Cu theoretisch	1,38	—10,4	2,7
Cu empirisch	1,44	—11,0	3,3
K theoretisch mit G	2,54	—5,34	1,00
K theoretisch mit F	2,51	—5,51	1,17
K empirisch	2,58	—5,47	1,15

Weitere Berechnungen für die Alkalimetalle könnte man noch für das metallische Na durchführen, da die Elektronen- und Potentialverteilung des Na^+ -Ions auf Grund des self-consistent field mit Berücksichtigung des Elektronenaustausches bestimmt wurde. Die ohne Berücksichtigung des Elektronenaustausches auf Grund des self-consistent field bestimmten Verteilungen für Rb^+ und Cs^+ kann man höchstwahrscheinlich auch hier zu einer genauen Berechnung der wichtigsten Metallkonstanten aus ganz analogen Gründen wie bei den Edelmetallen nicht heranziehen. Das metallische Li ist aus den Betrachtungen auszuschliessen, da das Li^+ -Ion nur 2 Elektronen besitzt, wodurch die Anwendung des auf statistischen Grundlagen fussenden Zusatzpotentials G nicht mehr gerechtfertigt wird.

Aus den in der vorliegenden Arbeit gegebenen Ausführungen und Resultaten ist zu sehen, dass man auf Grund der mit Hilfe des Zusatzpotentials G entwickelten Theorie sowohl die wichtigsten Konstanten und Eigenschaften der Edelmetalle als der Alkalimetalle und voraussichtlich auch der Erdalkalimetalle bestimmen kann.

LITERATUR

1. P. Gombás, Hung. Acta Phys. **I**, No. 2, 1947; Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949, S. 299: ff.
2. P. Gombás, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949, S. 146, 147.
3. P. Gombás, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949, S. 143 ff., 379; Zs. f. Phys. **93**, 378, 1935.
4. D. R. Hartree u. W. Hartree, Proc. Roy. Soc. London (A) **157**, 490, 1936.
5. Geiger-Scheels, Handb. d. Phys. **XXIV/2**, 2. Aufl., Springer, Berlin, 1933, S. 927.
6. R_0 aus F. Seitz, The Modern Theory of Solids, McGraw-Hill Book Comp., Inc., New-York and London, 1940; S auf den absoluten Nullpunkt der Temperatur reduziert (auf den sich unsere Betrachtungen beziehen) aus E. Rabinowitsch u. E. Thilo, Zs. f. phys. Chem. (B) **6**, 298, 1930.
7. D. R. Hartree u. W. Hartree, Proc. Roy. Soc. London (A) **166**, 450, 1938.
8. P. Gombás, Die statische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949, S. 317.

О ТЕОРИИ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ И ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

П. Гомбаш

Автор применяет новую статистическую формулировку принципа заполнения атомов в первую очередь к благородным металлам. Между прочим производит вычисления с медью, результаты которых хорошо совпадают с опытом. Далее показывает, что исходя из новых основ можно развивать и теорию щелочных металлов; применение теории к калию практически приводит к таким же результатам как результаты, полученные на основе одной прежней формулировки принципа заполнения, которые также очень хорошо совпадают с практикой.

ÜBER EINE THEORETISCHE BEGRÜNDUNG DER SLATERSCHEN HALBEMPIRISCHEN ATOMEIGENFUNKTIONEN

Von

P. GOMBÁS und R. GÁSPÁR

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen: 18. X. 1951.)

Von Slater wurden mit Hilfe der Forderung, dass man für die wichtigsten atomaren Konstanten, sowie Ionisierungsenergien, diamagnetische Suszeptibilität, Röntgenterme usw. mit der Erfahrung übereinstimmende Werte erhält, Atomeigenfunktionen von sehr einfacher Form angegeben, mit denen man die wichtigsten Atomkonstanten in ausgezeichneter Übereinstimmung mit der Erfahrung berechnen kann. Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist diese von Slater auf halbempirischem Wege gefundenen Eigenfunktionen ohne Zuhilfenahme empirischer oder halbempirischer Parameter theoretisch herzuleiten. Hierdurch wird zugleich das Variationsverfahren zur Bestimmung von Eigenfunktionen auch auf schwere Atome ausgedehnt, das bisher wegen mathematischer Schwierigkeiten nicht möglich war.

Eines der wichtigsten Probleme der Physik der Atomhülle ist die Bestimmung der Eigenfunktionen. Zur Zeit besitzt man im wesentlichen zwei Näherungsmethoden zur Lösung dieses Problems und zwar die Variationsmethode und die Methode des self-consistent field von Hartree bzw. von Hartree-Fock¹. Die Variationsmethode ist wegen der grossen Zahl der Orthogonalisierungsbedingungen bzw. wegen der durch diese bedingten mathematischen Schwierigkeiten nur auf leichtere Atome anwendbar. Die Hartreesche und Hartree-Focksche Methode erfordert eine enorme Rechenarbeit, die nur mit entsprechenden Maschinen bewältigt werden kann. Diese Schwierigkeiten versuchte Slater zu umgehen [1], indem er den radialen Anteil der Einelektron-eigenfunktionen der Atome in der Form

$$R = A r^{n^*-1} e^{-(Z-s)r/(n^* a_0)} \quad (1)$$

ansetzte, wo A eine Normierungskonstante, r die Entfernung vom Kern, n^* eine effektive Hauptquantenzahl, Z die Ordnungszahl des Atoms, s eine Abschirmungskonstante und a_0 den kleinsten Bohrschen Wasserstoffradius bezeichnet. Die Werte von n^* und s sind so bestimmt, dass für die leichtesten Atome von He bis Ne die Eigenfunktionen mit den mit Hilfe der Variationsmethode erhaltenen Eigenfunktionen möglichst gut übereinstimmen und für die schwere-

¹ Bezüglich der Variationsmethode und der Methode des self-consistent field vgl. man z. B. P. Gombás, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Birkhäuser, Basel, 1950; hier befinden sich auch weitere ausführliche Literaturangaben.

ren Atome die wichtigsten Atomkonstanten wie z. B. Röntgenterme, Ionisierungsenergien, diamagnetische Suszeptibilität im Einklang mit der Erfahrung wiedergegeben werden. Die Bestimmung der effektiven Quantenzahl n^* und der Abschirmungskonstante s geschieht bei Slater folgendermassen.

Für n^* sind folgende Werte zu setzen

wahre Hauptquantenzahl	n	=	1	2	3	4	5	6
effektive Hauptquantenzahl	n^*	=	1	2	3	3,7	4,0	4,2

Zur Bestimmung der Abschirmungskonstante s sind die Elektronen in folgende Gruppen einzuteilen

(1s), (2s, 2p), (3s, 3p), (3d), (4s, 4p), (4d, 4f), (5s, 5p), ...

es werden also jeweils die zu derselben Hauptquantenzahl gehörenden s - und p -Elektronen zu einer Gruppe zusammengefasst, während die zur derselben Hauptquantenzahl gehörenden d -, f -, ... Elektronen eine andere Gruppe bilden. Es wird angenommen, dass die Elektronengruppen vom Inneren des Atoms nach aussen hin in der angegebenen Reihenfolge aufeinander folgen. Für die Wahl der Abschirmungskonstante eines Quantenzustandes gelten nun nach Slater folgende drei Regeln:

1. Alle Elektronengruppen ausserhalb der in Betracht gezogenen tragen zur Abschirmungszahl nichts bei.

2. Jedes Elektron der Gruppe des in Betracht gezogenen Elektrons trägt zur Abschirmungszahl 0,35 bei, mit Ausnahme der (1s)-Gruppe, wo der Beitrag 0,30 ist.

3. Falls das in Betracht gezogene Elektron einer (s , p)-Gruppe angehört, so trägt jedes Elektron einer inneren Gruppe mit einer um 1 kleineren Hauptquantenzahl zur Abschirmungszahl 0,85 und jedes Elektron noch weiter innen befindlicher Gruppen 1,00 bei. Wenn das in Frage stehende Elektron einer (d , f)-Gruppe angehört, so liefern alle Elektronen weiter innen befindlicher Gruppen zur Abschirmungszahl den Beitrag 1,00.

Die Slaterschen Eigenfunktionen vom Typ (1) kann man mit dem üblichen Variationsverfahren durch die einfache Minimierung der mit diesen Eigenfunktionen gebildeten Schrödingerschen Energie nicht bestimmen, denn die Slaterschen Eigenfunktionen der zur gleichen Nebenquantenzahl aber verschiedenen Hauptquantenzahlen gehörenden Zustände sind aufeinander nicht orthogonal, demzufolge die Elektronen in den energetisch höher liegenden Zuständen in die tiefer liegenden Zustände hinabstürzen würden.

Unser Ziel ist nun mit Hilfe der von einem der Verfasser (P. Gombás) in einer der vorangehenden Arbeiten[2] hergeleiteten statistischen Formulierung des Besetzungsverbotens der von den Elektronen vollbesetzten Elektronenzustände die Slaterschen Eigenfunktionen herzuleiten und zugleich zu zeigen, wie man das Variationsverfahren zur Bestimmung der Eigenfunktionen auf

schwere Atome ausdehnen kann, das bisher nicht möglich war. In der zitierten Arbeit wurde gezeigt, dass man dieses Besetzungsverbot für ein Elektron mit der Nebenquantenzahl l durch ein Abstossungspotential von der Form

$$G_l = -\frac{\pi^2 e a_0}{8(2l+1)^2} D_l^2 - \frac{1}{4} e a_0 \frac{1}{r^2} \quad (2)$$

in Betracht ziehen kann, wo e die positive Elementarladung und D_l die radiale Dichte aller Elektronen des Atoms mit der Nebenquantenzahl l bezeichnet, die energetisch tiefer liegende Zustände besetzen, als das in Frage stehende Elektron. Es ist also z. B. im Falle des 4s-Elektrons im Kr-Atom oder Rb^+ -Ion D_l die radiale Dichte der zwei 1s, der zwei 2s und zwei 3s-Elektronen. Für die 1s-, 2p-, 3d-, 4f-, ... Zustände ist für jedes Atom und Ion $G_l \equiv 0$, man vgl. hierzu die zitierte Arbeit.

Durch Heranziehen dieses Zusatzpotentials kann man bezüglich der Orthogonalisierung der Eigenfunktionen so verfahren, als ob die Elektronen, welche die energetisch tieferen Zustände besetzen, gar nicht existierten; man wird jeder Orthogonalitätsforderung auf die Eigenfunktionen der energetisch tiefer liegenden Zustände enthoben und hat in dem mit dem Zusatzpotential ergänzten elektrostatischen Potential den absolut tiefsten Energiezustand zu bestimmen. Demzufolge besitzen die so bestimmten Eigenfunktionen keine Knoten, sie sind also von der Form (1).

Den Energieausdruck des Atoms erhält man also sehr einfach in der Weise, dass man den Schrödingerschen Energieausdruck mit der Energie ergänzt, die daraus resultiert, dass auf die Elektronen neben dem elektrostatischen Potential noch das Zusatzpotential G_l wirkt. Wenn man vom Elektronenaustausch absieht, d. h. die auf 1 normierte Eigenfunktion des Atoms als einfaches Produkt der Eigenfunktionen ψ_i der Einelektronzustände ansetzt, so ergibt sich für die Energie E des Atoms.

$$E = \sum_{i=1}^N \int \psi_i^* (\mathbf{r}) H_i \psi_i (\mathbf{r}) d\mathbf{v} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i,j=1}^N \iint \frac{|\psi_i(\mathbf{r})|^2 |\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{v} d\mathbf{v}' - e \int \sum_{i=1}^N G_{l_i} (\mathbf{r}) |\psi_i(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{v}. \quad (3)$$

Hier ist H_i der Operator

$$H_i = -\frac{1}{2} e^2 a_0 \Delta_i - \frac{Z e^2}{r_i}, \quad (4)$$

wo Δ_i den in den Koordinaten des i -ten Elektrons ausgedrückten Laplace-Operator und r_i die Entfernung des i -ten Elektrons vom Kern bezeichnet. Der Index i neben G_l steht hier nur zur Unterscheidung dieses Potentials für die einzelnen Elektronenzustände; dieser Unterschied kommt darin zum Ausdruck, dass für die verschiedenen Elektronenzustände D_l verschieden ist.

\mathbf{r} bedeutet den Ortsvektor, N die Anzahl der Elektronen im Atom. Der Strich neben der zweiten Summe soll andeuten, dass die Glieder mit $j = k$ in der Summe zu streichen sind.

Unser Ziel ist nun, die Eielektroneigenfunktionen aus der Minimumsforderung von E zu bestimmen, wobei wir den radialen Anteil von ψ_i in der Form (1) ansetzen: der winkelabhängige Anteil von ψ_i ist die entsprechende Kugelflächenfunktion. Nach Durchführung der Integration erhält man E als Funktion der effektiven Hauptquantenzahl n^* und der Abschirmungskonstanten s . Wir können nun so vorgehen, dass wir für n^* fixe Werte einsetzen und die Abschirmungskonstanten oder die Werte $(Z-s)/(n^*a_0)$ als Variationsparameter betrachten.

Die ganzzahligen Slaterschen Werte für n^* wollen wir beibehalten, die nicht-ganzzahligen n^* -Werte 3,7 und 4,2 müssen wir aber abändern, denn das Variationsverfahren zur Bestimmung der s -Werte kann man nur mit ganz- oder halbzahligen n^* -Werten durchführen. Für die nicht-ganzzahligen n^* -Werte setzen wir die zu diesen am nächsten stehende halbe Zahl. Wir setzen also

wahre Hauptquantenzahl	$n = 1$	2	3	4	5	6
effektive Quantenzahl	$n^* = 1$	2	3	3,5	4,0	4,5.

Während man im Falle der in Übereinstimmung mit Slater gewählten ganzzahligen n^* -Werte für den Parameter s Werte erwarten kann, die mit den Slaterschen übereinstimmen, ist dies bei den nicht-ganzzahligen n^* -Werten nicht der Fall. Man kann aber auch für die nicht-ganzzahligen n^* -Werte erwarten, dass man zu s -Werten gelangt, mit denen die Eigenfunktionen praktisch denselben Verlauf zeigen, wie mit den Slaterschen n^* - und s -Werten.

Wir haben die Berechnungen für den Grundzustand der Atome Ne, Ar, Kr und für den Grundzustand des Rb^+ -Ions durchgeführt. Diese besitzen im Grundzustand die folgende Elektronenverteilung

Ne, $Z = 10$, $(1s)^2$, $(2s)^2$, $(2p)^6$,

Ar, $Z = 18$, $(1s)^2$, $(2s)^2$, $(2p)^6$, $(3s)^2$, $(3p)^6$,

Kr, $Z = 36$, $(1s)^2$, $(2s)^2$, $(2p)^6$, $(3s)^2$, $(3p)^6$, $(3d)^{10}$, $(4s)^2$, $(4p)^6$,

Rb^+ , $Z = 37$, $(1s)^2$, $(2s)^2$, $(2p)^6$, $(3s)^2$, $(3p)^6$, $(3d)^{10}$, $(4s)^2$, $(4p)^6$.

Den auf 1 normierten radialen Anteil der Eigenfunktionen der Slaterschen Elektronengruppen haben wir gemäss den weiter oben Gesagten in folgender Form angesetzt

$$R_{n^* a_i} = \frac{(2 a_i)^{(2n^* + 1)/2}}{[4 \pi (2 n^*)!]^{1/2}} r^{n^* - 1} e^{-a_i r}, \quad (5)$$

wo für n^* die weiter oben angegebenen Werte zu setzen sind und a_i einen Variationsparameter bezeichnet, der für die $(1s)$, $(2s, 2p)$, $(3s, 3p)$, $(3d)$, $(4s, 4p)$ Elektronengruppen als verschieden angesetzt wurde, d. h. dass die Parameterwerte der einzelnen Gruppen von einander unabhängig variiert wurden.

Für die von r und von den Winkeln abhängige Eigenfunktion der einzelnen Elektronenzustände haben wir also

$$\psi_i = R_{n^0} \alpha_i Y_{lm}, \quad (6)$$

wo Y_{lm} die Kugelflächenfunktion in der üblichen Bezeichnung bedeutet.

Nach Einsetzen dieser ψ_i in den Energieausdruck (3) ergibt sich die Energie des Atoms E nach Durchführung elementarer Integrationen als Funktion der Variationsparameter α_i

$$E = E(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \quad (7)$$

Die Parameter α_i sind aus der Minimumsforderung der Energie, d. h. aus dem Gleichungssystem

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_1} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \alpha_2} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial E}{\partial \alpha_n} = 0 \quad (8)$$

zu bestimmen. Wenn wir die so bestimmten Parameter mit $\alpha_1^0, \alpha_2^0, \dots, \alpha_n^0$ bezeichnen, so erhält man für das Minimum der Energie, d. h. für die Energie des Atoms im vorgegebenen Quantenzustand

$$E_0 = E(\alpha_1^0, \alpha_2^0, \dots, \alpha_n^0). \quad (9)$$

Unsere Resultate für Ne, Ar, Kr, Rb⁺ sind zusammen mit den entsprechenden Slaterschen Resultaten in der Tabelle 1 dargestellt. Hierbei ist zu bemerken, dass unser Parameter α_i mit dem Slaterschen Parameter s in folgender Weise zusammenhängt

$$\alpha_i = \frac{Z - s}{n^2 a_0} \quad (10)$$

TABELLE 1.
Vergleich unserer Resultate mit den Resultaten von Slater
 α_i in $1/a_0$ -Einheiten

		α_1^0	α_2^0	α_3^0	α_4^0	α_5^0
Ne	Hier berechnet	9,73	2,80	—	—	—
	Slater.....	9,7	2,925	—	—	—
Ar	Hier berechnet	17,78	6,66	2,39	—	—
	Slater.....	17,7	6,925	2,25	—	—
Kr	Hier berechnet	35,80	15,55	7,29	6,35	2,46
	Slater.....	35,7	15,925	8,25	4,95	2,23
Rb ⁺	Hier berechnet	36,84	16,09	7,60	6,71	2,74
	Slater.....	36,7	16,425	8,5833	5,28	2,5

Wie aus der Tabelle zu sehen ist, stimmen die von uns berechneten α_i^0 -Werte mit den Slaterschen im allgemeinen sehr gut überein, grössere Abweichungen ergeben sich nur bei den α_4^0 -Werten, d. h. bei der (3d)-Elektronengruppe. Es ist sehr leicht möglich, dass in diesem Falle der Slatersche α_4^0 -Wert nicht genügend genau ist.

Zum Vergleich haben wir in den Figuren 1, 2, 3 und 4 für Ne, Ar, Kr und Rb^+ die mit den hier erhaltenen Eigenfunktionen berechnete radiale Elektronendichte

$$D = 4\pi r^2 \sum_{i=1}^N R_{n^*}^2 \alpha_i \quad (11)$$

mit der entsprechenden Slaterschen graphisch dargestellt. Zum weiteren Vergleich ist in diesen Figuren auch die mit der Methode des self-consistent field berechnete radiale Elektronendichte eingezeichnet [3]. Eine Ausnahme bildet nur das Kr-Atom, für das keine Hartreesche Tabellen vorliegen. Bei dem Vergleich mit der Verteilung des self-consistent field ist darauf zu achten, dass man zum Vergleich diejenigen Verteilungen heranzieht, die ohne Elektronenaustausch berechnet wurden, da dasselbe auch für unsere Verteilungen zutrifft. Für Ar und Rb^+ war es tatsächlich möglich die Auswahl dementsprechend zu treffen. Für Ne mussten wir jedoch eine Verteilung des self-consistent field heranziehen, die mit dem Elektronenaustausch korrigiert ist, da eine self-consistent-field-Verteilung ohne Austauschkorrektur für dieses Atom nicht vorliegt. Die Austauschkorrektur fällt jedoch hier nicht stark ins Gewicht. Wie man aus den

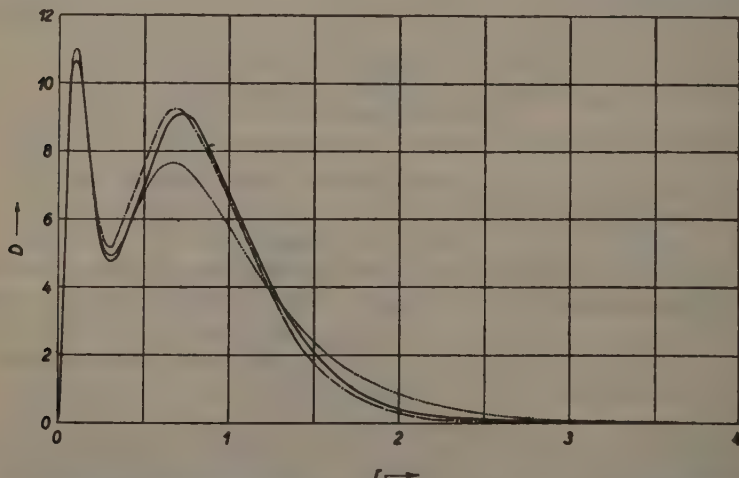


Fig. 1. Radiale Elektronenverteilung im Ne-Atom r in a_0 -Einheiten, D in $1/a_0$ -Einheiten
 — hier berechnet, - - - nach Slater, self-consistent field

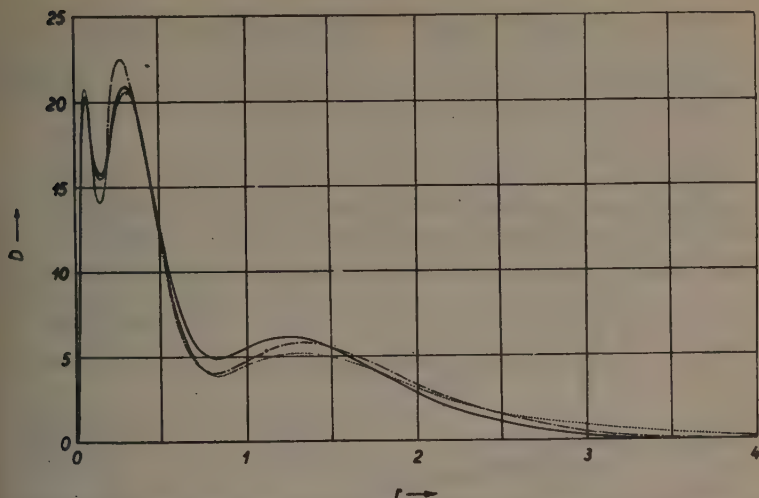


Fig. 2. Radiale Elektronenverteilung im Ar-Atom r in a_0 -Einheiten, D in $1/a_0$ -Einheiten.
 — hier berechnet, — nach Slater, self-consistent field

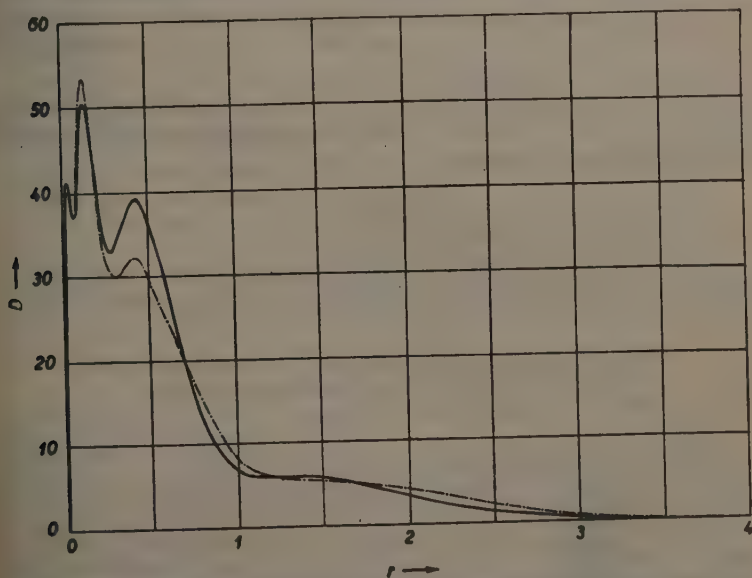


Fig. 3. Radiale Elektronenverteilung im Kr-Atom r in a_0 -Einheiten, D in $1/a_0$ -Einheiten.
 — hier berechnet, — nach Slater.

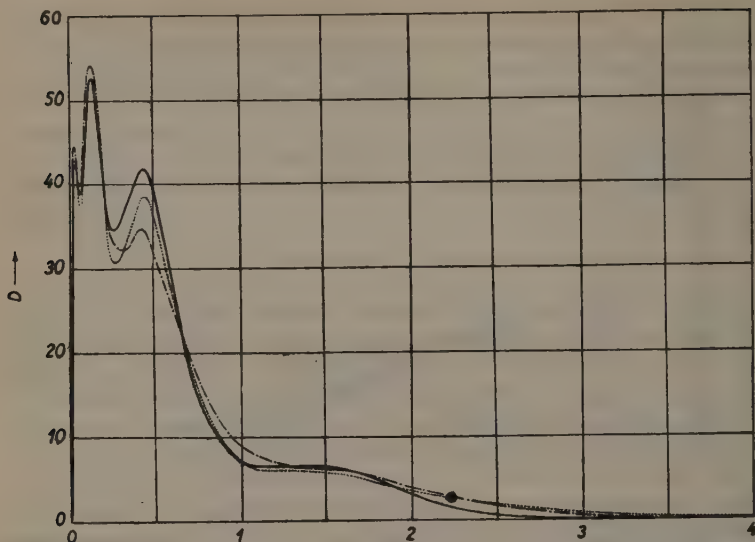


Fig. 4. Radiale Elektronenverteilung im Rb^+ -Ion r in a_0 -Einheiten, D in $1/a_0$ -Einheiten.
 — hier berechnet, — · — nach Slater, self-consistent field.

Figuren sieht, ist die Übereinstimmung der von uns berechneten Dichteverteilung mit der Dichteverteilung des self-consistent field und der Slaterschen Dichteverteilung sehr befriedigend.

LITERATUR

1. J. C. Slater, Phys. Rev. **36**, 57, 1930.
2. P. Gombás, Acta Physica Hungarica **I**, 285, 1952.
3. Für Ne: F. W. Brown, Phys. Rev. (2) **44**, 214, 1933; für Ar: (ohne Berücksichtigung des Elektronenaustausches) D. R. Hartree u. W. Hartree, Proc. Roy. Soc. London A **166**, 450, 1938; für Rb^+ : D. R. Hartree, Proc. Cambr. Phil. Soc. **24**, 111, 1928.

О ТЕОРЕТИЧЕСКОМ ОБОСНОВАНИИ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ, АТОМНЫХ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ СЛАТЕРА

П. Гомбаш и Р. Гашпар

Исходя из требования, чтобы для атомных постоянных, то есть для ионизационных энергий, диамагнитной восприимчивости, рентгеновских термов и т. д. получились бы величины, соответствующие практике, Слатер сообщил очень простые формы атомных собственных функций, при помощи которых делается возможным исчисление важнейших атомных постоянных в замечательном соответствии с практикой. Целью настоящей работы является вывести теоретически собственные функции, полученные Слатером при помощи полуэмпирического метода, из вариационного принципа, без эмпирических или полуэмпирических параметров. Таким образом распространяется вариационный метод определения собственных функций и на тяжелые атомы, к чему до сих пор, из-за математических трудностей, не представлялась возможность.

LETTERS TO THE EDITOR

ÜBER DIE MOHRENSTEINSCHES BERECHNUNG DES H_2 MOLEKÜLS

(Received 9. V. 1951.)

Mohrenstein hat in seiner Arbeit »Neue Berechnung des H_2 Moleküls« [1] einen neuen Weg zur Lösung des H_2 -Problems eingeschlagen. Der Verfasser hat das physikalische Problem auf folgende mathematische Aufgabe zurückgeführt:

Die Funktion

$$y = f(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} x^{\nu} \quad (1)$$

sei eine Lösung der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} [(x^2 - 1) y'] + (\alpha + \varrho x - \gamma x^2) y = 0. \quad (2)$$

Welcher Bedingung müssen die Koeffizienten a_{ν} genügen, damit $f(x)$ an der Stelle $x = -1$ von rechts stetig wird, also

$$\lim_{x \rightarrow -1+0} f(x) = f(-1) \quad (3)$$

existiert.

Mohrenstein gibt diese Beziehung im Wesentlichen in Gleichung [18] seiner zitierten Arbeit an. Er benützt diesen Zusammenhang richtig, ohne dies einwandfrei auszusprechen.

Das Ziel gegenwärtiger Arbeit ist, die erwähnte Beziehung streng zu formulieren und zu beweisen.

Wir betrachten statt (2) die etwas allgemeinere Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} [(x^2 - 1) y'] + p(x) y = 0 \quad (4)$$

wo

$$p(x) = \sum_{k=0}^m c_k x^k \quad (5)$$

ein Polynom vom Grade m ist. (1) sei eine Lösung von (4). Aus (1) und (4) folgt die Rekursionsformel

$$(\nu + 1) a_{\nu+1} = (\nu - 1) a_{\nu-1} + \frac{1}{\nu} \sum_{k=0}^m c_k a_{\nu-k-1}. \quad (6)$$

(Nach Definition sei $a_{\nu} = 0$, wenn $\nu < 0$.)

I. Hilfssatz:

$$|\nu a_{\nu}| \leq K \nu^{1/2}, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Beweis: Es sei ν_0 so gross, dass

$$\frac{M}{\nu} < (\nu + 1)^{1/2} - (\nu - 1)^{1/2} \quad \text{wenn } \nu \geq \nu_0. \quad (8)$$

Hier sei

$$M = \sum_{k=0}^m |c_k|. \quad (9)$$

Ferner sei K so gross, dass (7) erfüllt wird für $\nu \leq \nu_0$ und $|a_0| \leq K$. Es sei nun $\nu_1 > \nu_0$ und (Voraussetzung!) (7) sei erfüllt, wenn $\nu \leq \nu_1$. Aus Gleichung (6) folgt die Abschätzung

$$|(\nu_1 + 1) a_{\nu_1+1}| < K \left[(\nu_1 - 1)^{1/2} + \frac{M}{\nu_1} \right]$$

und unter Berücksichtigung der Gleichung (8):

$$|(\nu_1 + 1) a_{\nu_1+1}| < K (\nu_1 + 1)^{1/2}.$$

Somit haben wir (7) mittels totaler Induktion geprüft.

II. Hilfssatz: Die Koeffizienten der Potenzreihe (1) genügen der schärferen Abschätzung

$$a_{2n} = \frac{\alpha_0}{2n} + b_{2n}, \quad a_{2n-1} = \frac{\alpha_1}{2n-1} + b_{2n-1} \quad (10)$$

wobei

$$|b_\nu| < \frac{N}{\nu^{3/2}}, \quad \nu = 1, 2, \dots \quad (11)$$

und N von ν unabhängig ist.

Beweis: Es sei $\nu > 2m$, dann wird wegen $k \leq m$ und (7) $|a_{\nu-k-1}| < \frac{\sqrt{2} K}{\nu^{1/2}}$. Aus (6) folgt

$$|(\nu + 1) a_{\nu+1} - (\nu - 1) a_{\nu-1}| < \frac{\sqrt{2} K M}{\nu^{3/2}} = \frac{L}{\nu^{3/2}} \quad (12)$$

Damit werden die unendlichen Reihen

$$\sum_{\nu=1}^{\infty} [2\nu a_{2\nu} - (2\nu - 2) a_{2\nu-2}] = \alpha_0 \quad \text{und} \quad \sum_{\nu=1}^{\infty} [(2\nu - 1) a_{2\nu-1} - (2\nu - 3) a_{2\nu-2}] = \alpha_1 \quad (13)$$

absolut konvergent. Wenn wir die Summation beim Glied $n a_n - (n-2) a_{n-2}$ abbrechen, dann wird die Summe der berücksichtigten Glieder gleich $n a_n$,

und der Rest wird nach (12) kleiner sein als

$$\sum_{\nu=n+1}^{\infty} \frac{L}{\nu^{3/2}} < L \int_n^{\infty} \frac{dx}{x^{3/2}} = \frac{2L}{n^{1/2}}$$

Damit haben wir (10) und (11) geprüft. Es genügt nämlich, dass wir N so gross wählen, dass erstens $N > 2L$, zweitens, dass (11) für $\nu = 1, 2, \dots, 2m$ erfüllt wird.

Aus (1), (10), (11) folgt

$$y = \alpha_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{2n} + \alpha_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n-1}}{2n-1} + a_0 + \sum_{\nu=1}^{\infty} b_{\nu} x^{\nu} \quad (14)$$

Wegen der Abschätzung (11) ist die Funktion

$$\varphi(x) = a_0 + \sum_{\nu=1}^{\infty} b_{\nu} x^{\nu} \quad (15)$$

im abgeschlossenen Intervall $[-1, +1]$ stetig, da die Reihe an der rechten Seite nach (11) in diesem Intervalle gleichmässig konvergiert.

Somit erhalten wir aus (14) und (15):

$$y = \frac{\alpha_0 + \alpha_1}{2} \log \frac{1}{1-x} + \frac{\alpha_1 - \alpha_0}{2} \log(1+x) + \varphi(x), \quad (16)$$

$\varphi(x)$ stetig im Intervall $-1 \leq x \leq +1$.

Hieraus folgt sogleich, dass die notwendige und hinreichende Bedingung für die Existenz des Limes $\lim_{x \rightarrow -1+0} f(x)$ lautet:

$$\alpha_0 = \alpha_1$$

das heisst, $\lim_{n \rightarrow \infty} 2n a_{2n} = \lim_{n \rightarrow \infty} (2n-1) a_{2n-1}$.

Die Asymptotik der Lösung in der Umgebung der singulären Stellen der Bestimmtheit $+1$ und -1 folgt auch aus der allgemeinen Theorie linearer Differentialgleichungen. Unsere Betrachtungen haben den Vorteil elementaren Charakters, und behaupten etwas mehr, nämlich die absolute Konvergenz der Reihe (15) für $|x| = 1$ mit der Beschreibung einer numerisch durchführbaren Abschätzung des Restgliedes.

Nachträglicher Zusatz (4. IX. 1951):

(Über Herrn Preuss's Bemerkung und Herrn Mohrensteins Erwiderung [2].) Herr Preuss zeigte, dass mit einem Ansatz, der den Mohrensteinschen Randbedingungen genügt, für den Energieausdruck

$$E = \frac{\iint \psi H \psi \, d\tau_1 \, d\tau_2}{\iint \psi^2 \, d\tau_1 \, d\tau_2}$$

ein tieferer Wert erreicht werden kann, als der von Mohrenstein angegeben.

Meine Ergebnisse sichern die Exaktheit des Zusammenhanges zwischen ϱ und γ , die aus Gleichung (18)¹ erhalten wird. Die zahlenmässige Ungenauigkeit in der Lösung der Differentialgleichungen (7)¹ rührt also wahrscheinlich entweder von der Näherung (19)¹ oder von dem Ansatz (20)¹ und dessen Behandlung nach (21)¹ her.

G. FREUD

Physikalisches Institut
der Technischen Universität
Budapest.

LITERATUR

1. *A. V. Mohrenstein*, Neue Berechnung des H_2 Moleküls, *Zs. f. Phys.* **128**, 395, 1950.
2. *H. Preuss*, Berechnung des H_2 -Molekül-Grundzustandes, *Zs. f. Phys.* **130**, 239, 1951.
- A. V. Mohrenstein*, Berechnung des H_2 -Moleküls, *Zs. f. Phys.* **130**, 242, 1951.

¹ Diese Gleichungen sind wie in der Mohrensteinschen Arbeit [1] numeriert.

DIE STATISTISCHE THEORIE DES ATOMKERNS

I. Teil

Von
P. GOMBÁS

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER UNIVERSITÄT FÜR TECHNISCHE WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST
(Eingegangen : 2. Februar, 1952)

INHALTSÜBERSICHT

- § 1. Einleitung und Zusammenfassung
 - § 2. Grundlagen der statistischen Behandlungsweise eines freien Nucleonengases
 - § 3. Die kinetische Energie des Nucleonengases
 - § 4. Allgemeine Grundlagen der Berechnung der Wechselwirkung von Nucleonen
 - § 5. Wechselwirkungsenergie eines Nucleonengases
 - § 6. Absättigungscharakter der Austauschkräfte
 - § 7. Das statistische Modell des Atomkerns
 - § 8. Der statistische Kern mit konstanter Nucleonendichte
 - § 9. Berechnung der Dichteverteilung im Kern und der Energie des Kerns mit dem Ritzschen Verfahren
 - § 10. Resultate für die Kernenergien und die Dichteverteilungen im Kern
 - § 11. Vergleich mit der wellenmechanischen Berechnung des Deuterons
 - § 12. Diskussion der Resultate und der möglichen Erweiterungen
- Mathematischer Anhang

§ 1. Einleitung und Zusammenfassung

Die Anwendung statistischer Ansätze zur Erklärung der Eigenschaften und Gesetzmässigkeiten der Atomkerne reicht ziemlich weit zurück. Als erster versuchte *Majorana*¹ die statistische Theorie auf die Atomkerne anzuwenden, wobei aber nur einige qualitative — allerdings wesentliche — Resultate erzielt wurden. Die wichtigsten Grundlagen zur Weiterentwicklung der statistischen Kerntheorie wurden einerseits von *Heisenberg*² durch die explicite Berechnung der Austauschenergie für verschiedene Anziehungspotentiale und andererseits von *Weizsäcker*³ durch die Einführung der kinetischen Energiekorrektur, der sogenannten Inhomogenitätskorrektur gegeben. Die weiteren Berechnungen⁴ erfolgten dann auf diesen Grundlagen, wobei als Anziehungsenergie zwischen zwei Nucleonen meistens die Ansätze von der Form $-\gamma e^{-r_{ij}/r_0}$ und $-\gamma e^{-(r_{ij}/r_0)^2}$ zugrunde gelegt wurden, wo r_{ij} die gegenseitige Entfernung der beiden Nucleonen ist und γ sowie r_0 Konstante bezeichnen. Mit Ausnahme der zitierten Arbeit von *Flügge* hat man diese Berechnungen mit sehr vereinfachenden Annahmen

¹ Acta Physica

durchgeführt, indem man für die Dichteverteilung der Nucleonen einen stark vereinfachten Ausdruck benutzte, oder aber die Dichte bei Vernachlässigung der Inhomogenitätskorrektur als vollkommen konstant ansetzte. In dieser Beziehung bedeutet die schon erwähnte Arbeit von Flüge einen Fortschritt, indem in dieser für die Dichteverteilung keinerlei vereinfachende Annahmen gemacht wurden, sondern der Dichteverlauf und die Kernenergie für die leichten Kerne bis Si^{28} mit dem Ritzschen Verfahren ermittelt wurden. Allen diesen Berechnungen ist gemein, dass man mit diesen die Energie der Kerne nur in der Weise darstellen kann, dass sich je nach der Wahl der frei verfügbaren Parameter entweder für die leichten, oder für die schweren Kerne merkliche Abweichungen vom empirischen Befund ergeben. So ergibt sich z. B. bei Flüge, wo die Wahl der frei verfügbaren Parameter auf die ganz leichten Kerne abgestimmt ist, schon beim schwersten von Flüge behandelten Kern, Si^{28} , eine Abweichung der Energie von der empirischen um 12%. Eine Ausnahme bilden natürlich diejenigen Berechnungen, bei denen das Ziel die Auffindung einer mit der Erfahrung möglichst gut übereinstimmenden Formel ist, die drei, vier oder mehr empirische Parameter enthält; mit einer solchen Formel kann man natürlich die empirischen Resultate von den leichtesten bis zu den schwersten Kernen in ausgezeichneter Übereinstimmung mit der Erfahrung darstellen⁵. Dies ist aber mehr eine formelmässige Beschreibung des empirischen Befundes, nicht aber eine Zurückführung der empirischen Tatsachen auf allgemeine Grundgesetze, demzufolge diese Berechnungen von diesem Gesichtspunkt aus betrachtet von geringerem Interesse sind, womit natürlich der grosse heuristische Wert dieser Verfahren nicht in Abrede gestellt werden soll.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Bindungsenergie der Kerne, sowie die Lage der stabilen Isobare auf Grund der statistischen Theorie und der Annahme eines skalaren Yukawaschen Anziehungspotentials zwischen den Nucleonen aus dem allgemeinen Prinzip der Minimumforderung der Energie mit Hilfe des Ritzschen Verfahrens ohne jegliche willkürlichen Annahmen zu berechnen. Hierbei wird zwischen Neutronen-Protonen, Neutronen-Neutronen und Protonen-Protonen der nur von der gegenseitigen Entfernung der Teilchen abhängige Anteil der Wechselwirkungsenergie als gleich vorausgesetzt. Im Ausdruck der Wechselwirkungsenergie zweier Nucleonen wird nur eine Konstante als frei verfügbarer Parameter betrachtet, der den einzigen frei verfügbaren Parameter in der ganzen Theorie darstellt. Es wird gezeigt, dass man durch eine entsprechende Wahl dieses einen Parameters für die Bindungsenergie der Kerne Resultate erhält, die von den leichtesten Kernen bis zu den schwersten sehr gut mit der Erfahrung übereinstimmen. Die Abweichungen von den empirischen Werten liegen abgesehen von den ganz leichten Kernen innerhalb 7%; für die sehr leichten Kerne, deren Bindungsenergie als Funktion der Teilchenzahl keinen monotonen Verlauf zeigt, kann natürlich die statistische Theorie nur einen Mittelwert der stark schwankenden empirischen Werte liefern, was

durch die statistische Theorie auch tatsächlich geleistet wird. Die Lage der stabilen Isobare wird ebenfalls in sehr befriedigender Weise dargestellt.

Dass die hier entwickelte statistische Theorie, deren Anwendungsgebiet ihrem Charakter nach doch in erster Linie die Kerne mit grosser Teilchenzahl ist, auch für leichte Kerne so gute Resultate liefert, ist dem Umstand zuzuschreiben, dass wir zwei Korrekturen einführten, und zwar brachten wir eine Korrektur an der Austausch-Wechselwirkungsenergie der Nucleonen an, wodurch die aus dem Selbstaustausch der Teilchen resultierende Energie ausgeschaltet wird, weiterhin haben wir auch für die kinetische Energie eine Korrektur eingeführt, wodurch die statistische kinetische Energie für den Kern He^4 und für leichtere Kerne in den exakten wellenmechanischen Ausdruck übergeht. Durch diese Korrekturen wird erreicht, dass der statistische Ausdruck der Gesamtenergie der leichten Kerne den wellenmechanischen gut approximiert und einen guten Mittelwert der empirischen Resultate liefert.

Die statistische Theorie des Atomkerns gründet sich im wesentlichen auf das Verhalten eines Nucleonengases am absoluten Nullpunkt der Temperatur und auf die Wechselwirkung der Nucleonen. Wir befassen uns daher im folgenden zunächst mit den allgemeinen Grundlagen der statistischen Behandlungsweise eines freien Nucleonengases und im Anschluss hieran mit der kinetischen Energie eines freien Nucleonengases. Danach folgen die allgemeinen Grundlagen der Wechselwirkung von Nucleonen und die statistische Berechnung der Wechselwirkungsenergien. Auf diesen Grundlagen wird dann das statistische Kernmodell mit Hilfe des Variationsverfahrens entwickelt, und die Energie sowie die Dichteverteilung der Nucleonen von den leichtesten bis zu den schwersten Kernen, sowie die Energie einiger Isobare berechnet.

§ 2. Grundlagen der statistischen Behandlungsweise eines freien Nucleonengases

Im statistischen Modell des Atomkerns werden die Nucleonen als ein Nucleonengas am absoluten Nullpunkt der Temperatur betrachtet und statistisch behandelt. Die statistische Theorie eines Neutronen- oder Protonengases gründet sich auf die Statistik von Fermi und Dirac, die auf der Nichtunterscheidbarkeit der Teilchen und auf dem Pauli-Prinzip beruht. Das Pauli-Prinzip besagt bekanntlich, dass in einem vollständig gequantelten System jeder Quantenzustand höchstens von einem Teilchen besetzt werden kann. Der Quantenzustand ist hierbei durch den Zustand der Bahnbewegung und das Vorzeichen des Spins definiert. Die Brücke zwischen Quantentheorie und Statistik wird durch den bekannten Satz gegeben, dass auf das Volumen h^3 des Phasenraumes bei Berücksichtigung des Spins 2 Neutronen-Quantenzustände mit antiparallem Spin und 2 Protonen-Quantenzustände ebenfalls mit antiparallem Spin entfallen; wobei h die Plancksche Konstante bezeichnet. Eine Zelle vom Volumen

h^3 des Phasenraumes kann also höchstens durch die Bildpunkte von 2 Neutronen und 2 Protonen besetzt werden.

Wir befassen uns im folgenden mit einem freien Nucleonengas von Q_n Neutronen und Q_p Protonen, die sich im Volumen Ω befinden, von dessen Wänden wir annehmen, dass sie für Nucleonen undurchlässig sind. Das Nucleonengas betrachten wir, wie gesagt, als frei, d. h. wir nehmen an, dass in Ω ein konstantes Potential herrscht, das wir gleich 0 setzen können. Wir können uns hier auf sehr tiefe Temperaturen, d. h. auf den Fall beschränken, dass die Teilchen die möglichst tiefsten Energieniveaus besetzen. Bei sehr tiefen Temperaturen entstehen grosse Vereinfachungen, da in diesem Fall die Fermi-Diracsche Statistik nur durch die Bedingung zur Anwendung gelangt, dass eine Elementarzelle vom Volumen h^3 höchstens durch die Bildpunkte zweier Neutronen und zweier Protonen besetzt werden kann.

Die energetisch tiefsten Energieniveaus können wir folgendermassen beschreiben. Nach unseren Annahmen ist der Raum, in dem sich die Nucleonen befinden, potentialfrei, die Energie eines Nucleons ist daher eine rein kinetische, für die sich

$$u = \frac{p^2}{2M} \quad (1)$$

ergibt, wo p den Betrag des Impulses und M die Masse des Nucleons bezeichnet; M kann hier für Neutronen und Protonen als gleich gross angenommen und mit dem Mittelwert der Neutronen- und Protonenmasse gleichgesetzt werden. u ist also eine Funktion von p und hängt vom Ort nicht ab. Man kann sich daher auf den Impulsraum beschränken.

Wir befassen uns zunächst mit den Neutronen, für Protonen verläuft dann alles ganz analog. Wegen der Kräftefreiheit des Raumes sind alle Bewegungsrichtungen der Neutronen gleichberechtigt; da ausserdem die Energie der Neutronen nur vom Betrag p des Impulses abhängt, von der Impulsrichtung aber unabhängig ist, sind die energetisch tiefsten Quantenzustände in einer Kugel des Impulsraumes enthalten, deren Zentrum der Origo des Impulsraumes ist und deren Radius $p_{\mu n}$ den Betrag des maximalen Impulses der Neutronen darstellt. Jeder dieser energetisch tiefsten Quantenzustände ist am absoluten Nullpunkt der Temperatur maximal mit einem Neutron besetzt, alle Quantenzustände ausserhalb der Kugel sind leer.

Die Bestimmung von $p_{\mu n}$ kann folgendermassen geschehen. Das Volumen der Impuls-kugel ist $4\pi p_{\mu n}^3/3$. Den Neutronen im Volumen Ω entspricht also das Phasenraumvolumen $\Omega 4\pi p_{\mu n}^3/3$. Die Anzahl der Quantenzustände erhält man durch Division mit $h^3/2$. Da jeder dieser Quantenzustände 1 Neutron enthält, folgt

$$2 \frac{4\pi p_{\mu n}^3 \Omega}{3h^3} = Q_n. \quad (2)$$

Hieraus ergibt sich für $p_{\mu n}$

$$p_{\mu n} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} h q_n^{1/3}, \quad (3)$$

wo

$$q_n = \frac{Q_n}{\Omega}, \quad (4)$$

die Dichte des Neutronengases bezeichnet.

Für Protonen gilt alles in ganz entsprechender Weise. Wenn wir den Betrag des maximalen Impulses der Protonen mit $p_{\mu p}$ bezeichnen, so besteht der Zusammenhang

$$p_{\mu p} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} h q_p^{1/3}, \quad (5)$$

wo

$$q_p = \frac{Q_p}{\Omega} \quad (6)$$

die Dichte des Protonengases bedeutet.

§ 3. Die kinetische Energie des Nucleonengases

Wir gehen nun zur Berechnung der kinetischen Energie eines Nucleonengases über und befassen uns zunächst mit dem schon im vorangehenden Paragraphen beschriebenen freien Nucleonengas, das sich im Volumen Ω befindet und aus Q_n Neutronen und Q_p Protonen besteht. Wir ziehen zunächst das Neutronengas in Betracht. Solange man die Neutronen als vollkommen frei betrachten kann, ist die kinetische Energie des Neutronengases U_K^n die sogenannte Fermische kinetische Energie, die man durch den Ausdruck

$$U_K^n = \int u \, dn \quad (7)$$

darstellen kann⁶, wo wir u als eine Funktion von p auffassen und dementsprechend dn die Anzahl der Neutronen-Quantenzustände bedeutet, denen ein Impulsbetrag zwischen p und $p + dp$ entspricht; die Integration ist auf alle mit Neutronen besetzten Quantenzustände auszudehnen. Mit Rücksicht auf (1) und den Zusammenhang

$$dn = \frac{8\pi\Omega}{h^3} p^2 dp \quad (8)$$

ergibt sich für die Fermische kinetische Energie der Neutronen

$$U_K^n = \frac{4\pi\Omega}{Mh^3} \int_0^{p_{\mu n}} p^4 dp = \frac{4\pi\Omega}{5Mh^3} p_{\mu n}^5. \quad (9)$$

Nach Einsetzen des Ausdruckes für $p_{\mu n}$ aus (3) erhält man

$$U_K^n = \kappa_K \varrho_n^{5/3} \Omega, \quad (10)$$

wo κ_K die Konstante

$$\kappa_K = \frac{3}{40} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{M} \quad (11)$$

bezeichnet.

Für das Protonengas gilt all' dies in ganz analoger Weise, dementsprechend erhält man für die Fermische kinetische Energie der Protonen den Ausdruck

$$U_K^p = \kappa_K \varrho_p^{5/3} \Omega. \quad (12)$$

Die Fermische kinetische Energie des gesamten Nucleonengases wird also

$$U = U_K^n + U_K^p = \kappa_K (\varrho_n^{5/3} + \varrho_p^{5/3}) \Omega. \quad (13)$$

All' dies gilt für ein gänzlich freies Nucleonengas, d. h. für ein Nucleonengas mit konstanter Dichteverteilung. Es erhebt sich nun zunächst die Frage, wie sich die Fermische kinetische Energie für ein nicht freies Nucleonengas gestaltet? Zur Herleitung dieses Ausdruckes unterteilen wir das Volumen des Nucleonengases mit einem System von Scheidewänden in Teilvolumina in der Weise, dass sich in jedem Volumenelement dv nach viele Neutronen und Protonen befinden, und in den Volumenelementen das Potential praktisch konstant sei. Man kann dann die Nucleonen in den einzelnen Volumenelementen als ein freies Nucleonengas betrachten. Wenn wir die Neutronen- und Protonendichte in dv mit ϱ_n bzw. ϱ_p bezeichnen, so ergibt sich nach (10) und (12) für die Fermische kinetische Energie des Neutron- und Protonengases in dv der Ausdruck $\kappa_K \varrho_n^{5/3} dv$, bzw. $\kappa_K \varrho_p^{5/3} dv$. Die Fermische kinetische Energie aller Neutronen bzw. aller Protonen erhält man durch Integration dieser Ausdrücke über das ganze Volumen. Es wird also

$$U_K^n = \kappa_K \int \varrho_n^{5/3} dv, \quad U_K^p = \kappa_K \int \varrho_p^{5/3} dv. \quad (14)$$

Für die Fermische kinetische Energie des gesamten Nucleonengases folgt also der Ausdruck

$$U_K = U_K^n + U_K^p = \kappa_K \int (\varrho_n^{5/3} + \varrho_p^{5/3}) dv. \quad (15)$$

Für ein gänzlich freies Nucleonengas, d. h. im Fall konstanter Dichteverteilungen gehen natürlich diese Ausdrücke in die entsprechenden Ausdrücke (10), (12) und (13) über.

Der Ausdruck (15) gibt nur dann die volle kinetische Energie des Nucleonengases, wenn die Nucleonen in den Volumenelementen dv vollkommen frei sind. Wenn man die Nucleonen in den Volumenelementen dv nicht als vollkommen frei betrachten kann, dann hat man diesen Ausdruck noch mit der sogenann-

ten Weizsäckerschen Inhomogenitätskorrektur zu ergänzen. Diese wurde von Weizsäcker ausführlich begründet⁷, worauf wir hier aber nicht näher eingehen wollen. Statt dessen wählen wir hier einen sehr stark vereinfachten Weg zur Herleitung dieser Korrektur, der gerade wegen seiner Einfachheit das Wesentliche an der Sache sehr gut hervortreten lässt.

Wir ziehen zunächst wieder die Neutronen in Betracht. Ohne das Pauli-Prinzip, also im Falle der Bose-Statistik, würden die Neutronen im Gleichgewicht alle den energetisch möglichst tiefsten Quantenzustand besetzen. Wenn wir die Eigenfunktion dieses Zustandes mit ψ bezeichnen, so ergibt sich in diesem Fall für die Dichte ϱ_n und die Schrödingersche kinetische Energie U_J^n der Neutronen

$$\varrho_n = Q_n |\psi|^2, \quad (16)$$

$$U_J^n = Q_n \frac{h^2}{8\pi^2 M} \int |\text{grad } \psi|^2 dv. \quad (17)$$

Durch Elimination von ψ folgt

$$U_J^n = \kappa_J \int \frac{(\text{grad } \varrho_n)^2}{\varrho_n} dv, \quad (18)$$

wo κ_J die Konstante

$$\kappa_J = \frac{h^2}{32\pi^2 M} \quad (19)$$

bezeichnet; für M kann man auch hier einen Mittelwert der Neutron- und Protonmasse einsetzen. U_J^n ist die Weizsäckersche Inhomogenitätskorrektur für Neutronen.

Auf ganz ähnliche Weise erhält man für die Inhomogenitätskorrektur der Protonen

$$U_J^p = \kappa_J \int \frac{(\text{grad } \varrho_p)^2}{\varrho_p} dv. \quad (20)$$

Die Inhomogenitätskorrektur des gesamten Nucleonengases wird also

$$U_J = U_J^n + U_J^p. \quad (21)$$

Wie zu sehen ist, verschwindet U_J für eine konstante Nucleonenverteilung.

Wie aus der Herleitung folgt, ist U_J die kinetische Energie eines Nucleonengases, für dessen Teilchen das Pauli-Prinzip nicht besteht. Die Berücksichtigung des Pauli-Prinzips, demzufolge nicht alle Teilchen den energetisch tiefsten Quantenzustand besetzen können, geschieht in der Weise, dass man neben U_J auch die Fermische kinetische Energie U_K in Rechnung zu stellen hat, die eine alleinige Folge des Pauli-Prinzips ist. Durch die Energie U_K werden dann die Teilchen gemäss dem Pauli-Prinzip in die energetisch höheren Quantenzustände gehoben. Hierbei wird die Annahme gemacht, dass $\text{grad } \varrho_n$ und $\text{grad } \varrho_p$

vom Impulsvektor, d. h. vom Quantenzustand unabhängig sind. All' dies zeigt sehr anschaulich die Rolle der beiden kinetischen Energieanteile.

Bei der gleichzeitigen Berücksichtigung der beiden kinetischen Energieanteile U_K und U_J begeht man jedoch einen Fehler, was man am einfachsten für den Fall von 2 Neutronen und 2 Protonen sehen kann. In diesem Fall befinden sich nämlich sowohl die beiden Neutronen, wie die beiden Protonen im energetisch tiefsten Quantenzustand, so dass der Energieanteil U_J genau die volle kinetische Energie der Teilchen darstellt, der Energieanteil U_K muss also in diesem Fall verschwinden. Dies folgt auch daraus, dass in diesem Fall das Pauli-Prinzip keinerlei Rolle spielt, da keine Teilchen in energetisch höhere Quantenzustände zu heben sind, demzufolge der durch das Pauli-Prinzip bedingte Energieanteil U_K verschwinden muss. Tatsächlich verschwindet jedoch U_K nicht. Dies liegt im Wesen der statistischen Behandlungsweise, bei welcher im Phasenraum bzw. im Impulsraum auch von einem einzelnen Teilchen ein endliches Volumen beansprucht wird, und somit die kinetische Energie der beiden Teilchen im tiefsten Quantenzustand nicht nur in U_K sondern auch in U_J enthalten ist. Hieraus ist zugleich zu sehen, dass dieser Fehler natürlich nicht nur für den Fall von 2 Neutronen und 2 Protonen, sondern auch für alle anderen Teilchenzahlen besteht. Allerdings ist er nur für kleine Teilchenzahlen bedeutend, für grosse Teilchenzahlen ist er im Verhältnis zur gesamten kinetischen Energie klein.

Es fragt sich nun, wie man diesen Fehler möglichst einfach korrigieren kann?⁸ Ein Weg hierzu besteht darin, dass man die Fermische kinetische Energie eines Teilchens im energetisch tiefsten Quantenzustand der mittleren Fermischen kinetischen Energie eines Teilchens gleichsetzt und diese für die im tiefsten Energiezustand befindlichen beiden Neutronen und Protonen in Abzug bringt. Die mittlere Fermische kinetische Energie eines Neutrons und eines Protons ist U_K^n/Q_n bzw. U_K^p/Q_p . Die Korrektur besteht also nach unseren Annahmen darin, dass man die Energie $2U_K^n/Q_n + 2U_K^p/Q_p$ von U_K in Abzug bringt, oder was dasselbe ist, in (15) U_K mit dem Faktor $k_n = 1 - \frac{2}{Q_n}$ und U_K^p mit dem Faktor $k_p = 1 - \frac{2}{Q_p}$ multipliziert. Die gesamte kinetische Energie unseres Nucleonengases wird also

$$U_K = k_n U_K^n + k_p U_K^p + U_J. \quad (22)$$

Die Faktoren k_n und k_p sind für $Q_n = 2$ und $Q_p = 2$ gleich Null, demzufolge in diesem Fall U_K verschwindet, die Korrektur führt also hier zum exakten Wert der kinetischen Energie. Weiterhin muss $k_n U_K^n$ auch für $Q_n = 1$ und $k_p U_K^p$ auch für $Q_p = 1$ verschwinden, was durch die Korrekturfaktoren nicht geleistet wird, man muss also die Zusatzvorschrift machen, dass der Korrekturfaktor k_n auch für $Q_n < 2$ und der Korrekturfaktor k_p auch für

$Q_p < 2$ gleich 0 zu setzen ist. Die kinetische Energie ist also dann auch in diesen Fällen mit dem Ausdruck U_j gleich, der auch in diesen Fällen tatsächlich den exakten Ausdruck der kinetischen Energie darstellt. Für grosse Teilchenzahlen wird die Korrektur ungenau, was aber unwesentlich ist, da für grosse Teilchenzahlen die Korrektur im Verhältnis zur gesamten kinetischen Energie unbedeutend wird.

§ 4. Allgemeine Grundlagen der Berechnung der Wechselwirkung von Nucleonen

Zur statistischen Berechnung der Wechselwirkungsenergie von Nucleonen ist es wesentlich, dass wir uns zunächst auf Grund der Wellenmechanik ganz allgemein mit der Berechnung der Wechselwirkung von Nucleonen befassen. Wir wollen annehmen, dass unser Nucleonengas wieder aus Q_n Neutronen und Q_p Protonen besteht. Zur wellenmechanischen Beschreibung des Gesamtsystems gehen wir von der Hartree-Fock'schen Näherung aus, d. h. wir beschreiben das System durch Einteilcheneigenfunktionen, und zwar nehmen wir an, dass die Q_n Eigenfunktionen der Q_n Neutronenzustände $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{Q_n}$ und die Q_p Eigenfunktionen der Q_p Protonenzustände $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{Q_p}$ seien. Mit Rücksicht auf das Pauli-Prinzip kann man dann die Eigenfunktion des Gesamtsystems in folgender Form darstellen⁹

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{Q_n! Q_p!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(q_n^1) & \varphi_1(q_n^2) & \dots & \varphi_1(q_n^{Q_n}) \\ \varphi_2(q_n^1) & \varphi_2(q_n^2) & \dots & \varphi_2(q_n^{Q_n}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{Q_n}(q_n^1) & \varphi_{Q_n}(q_n^2) & \dots & \varphi_{Q_n}(q_n^{Q_n}) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(q_p^1) & \psi_1(q_p^2) & \dots & \psi_1(q_p^{Q_p}) \\ \psi_2(q_p^1) & \psi_2(q_p^2) & \dots & \psi_2(q_p^{Q_p}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{Q_p}(q_p^1) & \psi_{Q_p}(q_p^2) & \dots & \psi_{Q_p}(q_p^{Q_p}) \end{vmatrix}, \quad (23)$$

wo q_n^i statt der räumlichen Koordinaten $r_n^i(x_n^i, y_n^i, z_n^i)$ und der Spinkoordinate σ_n^i des i -ten Neutrons sowie q_p^i statt der räumlichen Koordinaten $r_p^i(x_p^i, y_p^i, z_p^i)$ und der Spinkoordinate σ_p^i des i -ten Protons steht; r_n^i und r_p^i bezeichnen den Ortsvektor des i -ten Neutrons bzw. des i -ten Protons. Von den Einteilcheneigenfunktionen φ_i und ψ_i können wir ohne Einschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass sowohl die Neutronen-Eigenfunktionen φ_i unter sich, wie die Protonen-Eigenfunktionen ψ_i unter sich orthogonal sind. Wir setzen ausserdem voraus, dass sie auch normiert sind, es ist dann auch Ψ normiert.

Bei der im folgenden zu gebenden Herleitung des allgemeinen Ausdruckes der Wechselwirkungsenergie der Nucleonen sehen wir zunächst von der Coulomb'schen Wechselwirkung der Protonen ab und ziehen zunächst die Nucleonenwechselwirkung allein in Betracht. Zur Herleitung des allgemeinen Ausdruckes der Wechselwirkungsenergie der Nucleonen brauchen wir einen Ansatz für die Nucleonenwechselwirkung. Dieser ist unter Berücksichtigung der experimentellen Befunde zu wählen, dass erstens diese Wechselwirkung einen Absättigungscharakter aufweist und zweitens, dass die Kernkräfte von sehr kurzer Reich-

weite sind. Der ersten Tatsache kann man durch eine entsprechende Wahl des Mechanismus der Wechselwirkung und zwar durch Voraussetzung einer Austauschwechselwirkung zwischen den Nucleonen (man vgl. § 6) und der zweiten durch einen entsprechenden Ansatz für das Wechselwirkungspotential der Nucleonen Rechnung tragen. Für die Wechselwirkungsenergie der Nucleonen machen wir zunächst den ganz allgemeinen Ansatz, dass sich diese aus der paarweisen Wechselwirkung je zweier Teilchen folgendermassen zusammensetzt

$$W = \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k=1}^{Q_p} G_{ik}(q_n^i, q_p^k) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k \neq i}^{Q_n} N_{ik}(q_n^i, q_n^k) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} P_{ik}(q_p^i, q_p^k), \quad (24)$$

wo G_{ik} die Wechselwirkungsenergie des i -ten Neutrons und k -ten Protons, N_{ik} die Wechselwirkungsenergie des i -ten und k -ten Neutrons und P_{ik} die des i -ten und k -ten Protons bezeichnet. Die Faktoren $1/2$ vor der zweiten und dritten Summe auf der rechten Seite stehen zur Vermeidung der doppelten Zählung der Neutronen- und Protonenpaare.

Mit dem Ausdruck (24) und der Eigenfunktion (23) erfolgt dann die Berechnung des wellenmechanischen Erwartungswertes der Wechselwirkungsenergie W_A der Nucleonen ganz analog zur Wechselwirkungsenergie der Elektronen in Atomen mit mehreren Elektronen.¹⁰ Man erhält

$$\begin{aligned} W_A = & \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k=1}^{Q_p} \iint \varphi_i^*(q_n) \psi_k^*(q_p) G_{ik}(q_n, q_p) \varphi_i(q_n) \psi_k(q_p) d\tau_n d\tau_p + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k \neq i}^{Q_n} \iint \varphi_i^*(q_n) \varphi_k^*(q'_n) N_{ik}(q_n, q'_n) \varphi_i(q_n) \varphi_k(q'_n) d\tau_n d\tau'_n - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k \neq i}^{Q_n} \iint \varphi_k^*(q_n) \varphi_i^*(q'_n) N_{ik}(q_n, q'_n) \varphi_i(q_n) \varphi_k(q'_n) d\tau_n d\tau'_n + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \iint \psi_i^*(q_p) \psi_k^*(q'_p) P_{ik}(q_p, q'_p) \psi_i(q_p) \psi_k(q'_p) d\tau_p d\tau'_p - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \iint \psi_k^*(q_p) \psi_i^*(q'_p) P_{ik}(q_p, q'_p) \psi_i(q_p) \psi_k(q'_p) d\tau_p d\tau'_p, \end{aligned} \quad (25)$$

wo die Integration über τ_n, τ_p usw. ausser einer Integration über die räumlichen Koordinaten der Neutronen und Protonen auch eine Summation über die Spinkoordinate bedeutet. Von den fünf Doppelsummen ist die erste die gegenseitige Wechselwirkungsenergie der Neutronen und der Protonen, die zweite und dritte die Wechselwirkungsenergie der Neutronen und schliesslich die vierte und fünfte die Wechselwirkungsenergie der Protonen. Es sei noch bemerkt

dass die dritte und fünfte Doppelsumme die sogenannte Austauschenergie der Neutronen bzw. Protonen darstellt; diese tritt nur zwischen gleichen Teilchen auf und resultiert aus der Determinantendarstellung der Eigenfunktion dieser Teilchen.

Wie sich zeigen lässt (man vgl. hierzu § 6), kann man dem Absättigungscharakter der zwischen den Nucleonen wirkenden Kräfte dadurch Rechnung tragen, dass man für die Wechselwirkung der Nucleonen eine reine Austauschwechselwirkung voraussetzt. Dementsprechend setzen wir für G_{ik} eine Austauschwechselwirkung an und zwar wählen wir für diese eine Wechselwirkung vom Majoranaschen Typ¹¹, d. h. wir nehmen an, dass beim Platzwechsel eines Protons und Neutrons der Spin an der Ladung haftet. Durch den Operator G_{ik} werden also nur die Ortskoordinaten des i -ten Neutrons und k -ten Protons vertauscht. Man hat also

$$G_{ik}(q_n, q_p) = J_{np}(r_{np}) \Pi(r_n, r_p), \quad (26)$$

wo $\Pi(r_n, r_p)$ den Permutationsoperator bezeichnet, der nur die Ortskoordinaten des Neutrons und Protons vertauscht, die Spinkoordinaten aber unverändert lässt, $J_{np}(r_{np})$ ist eine nur von der gegenseitigen Entfernung $r_{np} = |r_n - r_p|$ des Neutrons und Protons abhängige gewöhnliche Funktion, auf die wir später zu sprechen kommen. Mit diesem Ausdruck für G_{ik} folgt

$$G_{ik}(q_n, q_p) \varphi_i(r_n, \sigma_n) \psi_k(r_p, \sigma_p) = \varphi_i(r_p, \sigma_n) \psi_k(r_n, \sigma_p) J_{np}(r_{np}). \quad (27)$$

Wenn wir den Zustand der Bahnbewegung vom Spinzustand in erster Näherung als unabhängig betrachten, dann können wir die Eigenfunktionen φ_i und ψ_i als Produkte einer nur von den Ortskoordinaten und einer nur von der Spinkoordinate abhängigen Spinfunktion folgendermassen darstellen

$$\varphi_i = u_i(r) \eta(\sigma), \quad \psi_i = w_i(r) \eta(\sigma). \quad (28)$$

Hier ist $u_i(r)$ und $w_i(r)$ der nur von den Ortskoordinaten abhängige Anteil der Neutronen bzw. Protoneneigenfunktion; $\eta(\sigma)$ bedeutet die Spinfunktion, die wir für die beiden Werte der Spinkoordinate $\sigma = +1/2$ und $\sigma = -1/2$ mit η_+ bzw. mit η_- bezeichnen. Mit Hilfe von (27) und (28) lässt sich die Summation über die Spinkoordinaten im ersten Integral im Ausdruck von (25) einfach durchführen und man erhält für die gegenseitige Wechselwirkungsenergie des i -ten Neutrons und k -ten Protons

$$\varepsilon_{ik}^{np} = \iint u_i^*(r_n) w_k^*(r_p) u_i(r_p) w_k(r_n) J_{np}(r_{np}) dv_n dv_p, \quad (29)$$

wo dv_n und dv_p die Raumelemente in den entsprechenden Koordinatenräumen bezeichnen. Wie man sieht, ist ε_{ik}^{np} von der Form einer Austauschenergie, die aus der Vertauschung des Neutrons und Protons resultiert.

Wir kommen nun auf die Neutron-Neutron und Proton-Proton Wechselwirkung, d. h. auf die zweite bis fünfte Doppelsumme im Ausdruck (25) zu spre-

chen. Für diese Wechselwirkung der gleichen Teilchen kann man entweder eine spinabhängige oder eine spinunabhängige Wechselwirkung ansetzen, wobei nochmals betont sei, dass wir hier zunächst von der spinunabhängigen Coulombischen Wechselwirkung absehen. Im Falle einer spinunabhängigen Wechselwirkung würde neben der Austauschwechselwirkungsenergie der Teilchen auch noch die gewöhnliche Wechselwirkungsenergie auftreten, was, bei den Atomkernen zu einer gänzlich fehlgehenden Abhängigkeit der Bindungsenergie von der Teilchenzahl führen würde. Man muss daher für die Wechselwirkung gleicher Teilchen eine Spinabhängigkeit voraussetzen. Es erweist sich als zweckmässig folgenden Ansatz zu machen

$$N_{ik}(q_n, q'_n) = -\frac{1}{3} J_{nn}(r_{nn'}) (S, S'), \quad (30)$$

$$P_{ik}(q_p, q'_p) = -\frac{1}{3} J_{pp}(r_{pp'}) (S, S'). \quad (31)$$

Hier bezeichnen q_n und q'_n die Koordinaten des i -ten und k -ten Neutrons und zwar ist in q_n, q'_n auch die Spinkoordinate der Teilchen inbegriffen, $r_{nn'}$ bezeichnet die gegenseitige Entfernung der beiden Neutronen, d. h. es ist $r_{nn'} = |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'_n|$, schliesslich bezeichnet S bzw. S' den Paulischen Spinoperator bezogen auf die beiden Teilchen. Die in (31) stehenden Grössen mit den Indices p, p' beziehen sich auf das i -te und k -te Proton und haben für diese eine ganz analoge Bedeutung. Der Faktor $-\frac{1}{3}$ wurde eingeführt um zu erreichen, dass die Wechselwirkung zwischen zwei Neutronen mit entgegengesetzter Spinrichtung sowie zwischen zwei Protonen mit ebenfalls entgegengesetzter Spinrichtung gleich J_{nn} bzw. J_{pp} wird. Dass dies tatsächlich erreicht wird, ist sofort zu sehen, da in diesem Fall $S + S'$ gleich Null ist und somit der Zusammenhang

$$2(S, S') = (S + S')^2 - S^2 - S'^2 = -6 \quad (32)$$

besteht.¹²

Zur Berechnung der Wechselwirkungsenergie gleicher Teilchen setzen wir die Eigenfunktion der Teilchen wieder als Produkt einer nur von den Ortskoordinaten abhängigen Funktion und einer Spinfunktion in der Form (28) voraus. Des Weiteren halber sei erwähnt, dass die Spinfunktionen den folgenden Beziehungen genügen

$$S_x \eta_+ = \eta_- , \quad S_x \eta_- = \eta_+ , \quad (33)$$

$$S_y \eta_+ = i \eta_- , \quad S_y \eta_- = -i \eta_+ , \quad (34)$$

$$S_z \eta_+ = \eta_+ , \quad S_z \eta_- = -\eta_- . \quad (35)$$

Es ist also z. B.

$$(S, S') \eta_+(\sigma) \eta_+(\sigma') = \eta_+(\sigma) \eta_+(\sigma') \quad (36)$$

und

$$(S, S') \eta_+(\sigma) \eta_-(\sigma') = -\eta_+(\sigma) \eta_-(\sigma') + 2 \eta_-(\sigma) \eta_+(\sigma') . \quad (37)$$

Die Berechnung der Wechselwirkungsenergie gleicher Teilchen kann auf Grund dieser Beziehungen sehr einfach erfolgen. Wir führen hier die Berechnungen für Neutronen durch; für Protonen verläuft alles ganz analog. Wir berechnen zunächst die Wechselwirkungsenergie eines Neutrons mit positivem Spin im Zustand $\varphi_i = u_i\eta_+$ mit zwei Neutronen in den beiden Zuständen $\varphi_{k_1} = u_k\eta_+$ und $\varphi_{k_2} = u_k\eta_-$, die sich nur in der Spinrichtung unterscheiden.

Die gewöhnliche Wechselwirkungsenergie der beiden Neutronenpaare wird gemäss der zweiten Zeile in (25) durch die Summe der folgenden beiden Integrale dargestellt

$$-\frac{1}{3} \iint |u_i(\mathbf{r})|^2 |u_k(\mathbf{r}')|^2 \eta_+(\sigma) \eta_+(\sigma') (S, S') \eta_+(\sigma) \eta_+(\sigma') J_{nn}(r_{nn'}) d\tau_n d\tau'_n, \quad (38)$$

$$-\frac{1}{3} \iint |u_i(\mathbf{r})|^2 |u_k(\mathbf{r}')|^2 \eta_-(\sigma) \eta_-(\sigma') (S, S') \eta_+(\sigma) \eta_-(\sigma') J_{nn}(r_{nn'}) d\tau_n d\tau'_n, \quad (39)$$

wo zu beachten ist, dass die Integration auch eine Summation über die Spinkoordinate bedeutet. Mit Rücksicht auf (36) und (37) und darauf, dass die Spinfunktionen η_+ und η_- auf einander orthogonal sind, ergibt die Summation über die Spinkoordinaten im ersten Integral +1 und im zweiten -1. Da die übrigen Teile der beiden Integrale identisch sind, heben sich die beiden Integrale in der zweiten Doppelsumme in (25) weg. Somit verschwindet die ganze zweite Doppelsumme in (25), d. h. die gewöhnliche Wechselwirkungsenergie der Neutronen.

Die Austauschenergie der beiden Neutronenpaare erhält man entsprechend der dritten Zeile in (25) als Summe der folgenden beiden Integrale

$$+\frac{1}{3} \iint u_k^*(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}') \eta_-(\sigma) \eta_+(\sigma') (S, S') \eta_+(\sigma) \eta_+(\sigma') J_{nn}(r_{nn'}) d\tau_n d\tau'_n, \quad (40)$$

$$+\frac{1}{3} \iint u_k^*(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}') \eta_-(\sigma) \eta_+(\sigma') (S, S') \eta_+(\sigma) \eta_-(\sigma') J_{nn}(r_{nn'}) d\tau_n d\tau'_n. \quad (41)$$

Auf dieselbe Weise wie im vorangehenden Fall erhält man hier durch die Summation über die Spinkoordinaten beim ersten Integral +1 und beim zweiten +2. Da die übrigen Teile der Integrale auch hier identisch sind, ergibt sich für die Summe der Austauschenergie der beiden Neutronenpaare, d. h. für die Summe von (40) und (41)

$$\iint u_k^*(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}') J_{nn}(r_{nn'}) dv dv'. \quad (42)$$

Dies ist die Austauschenergie eines Neutrons im Zustand $\varphi_i = u_i\eta_+$ mit zwei Neutronen im Zustand $\varphi_{k_1} = u_k\eta_+$ und $\varphi_{k_2} = u_k\eta_-$, d. h. mit zwei Neutronen, die sich im selben Bahnzustand mit antiparallelen Spins befinden. Die mittlere Austauschenergie zwischen den beiden Neutronen i und k ist also

$$\varepsilon_{ik}^{nn} = \frac{1}{2} \iint u_k^*(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}') J_{nn}(r_{nn'}) dv dv'. \quad (43)$$

Mit dem Ansatz (31) verläuft für Protonen alles ganz analog, die gewöhnliche Wechselwirkungsenergie verschwindet auch im Falle von Protonen, und man erhält für die mittlere Austauschenergie zwischen den beiden Protonen i und k

$$\varepsilon_{ik}^{pp} = \frac{1}{2} \iint w_k^*(\mathbf{r}) w_i^*(\mathbf{r}') w_i(\mathbf{r}) w_k(\mathbf{r}') J_{pp}(r_{pp'}) dv dv'. \quad (44)$$

Für die aus der Neutron-Proton Wechselwirkung resultierende Gesamtenergie W_A^{np} , sowie für die aus der Neutron-Neutron und Proton-Proton Wechselwirkung resultierende Gesamtenergie W_A^{nn} bzw. W_A^{pp} erhält man also

$$W_A^{np} = \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \varepsilon_{ik}^{np}, \quad W_A^{nn} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k \neq i}^{Q_n} \varepsilon_{ik}^{nn}, \quad W_A^{pp} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \varepsilon_{ik}^{pp}. \quad (45)$$

Somit ergibt sich für die aus der Wechselwirkung aller Nucleonen resultierenden Gesamtenergie

$$W_A = W_A^{np} + W_A^{nn} + W_A^{pp}. \quad (46)$$

Wir müssen hier nun noch den nur von der gegenseitigen Entfernung der Nucleonen abhängigen Anteil der Nucleonenwechselwirkung, d. h. die Funktionen $J_{np}(r_{np})$, $J_{nn}(r_{nn})$ und $J_{pp}(r_{pp})$ näher definieren. Gemäss dem experimentellen Befund, dass die Kernkräfte eine sehr kurze Reichweite und zwar eine Reichweite von der Grössenordnung 10^{-13} cm besitzen, setzt man für J_{np} , J_{nn} und J_{pp} mit wachsender gegenseitiger Entfernung der Nucleonen sehr rasch abklingende Funktionen an. Wir setzen hier für die Wechselwirkung der Nucleonen ein skalares zentrales Yukawa-Potential an, d. h. wir nehmen an, dass die Austauschwechselwirkung der Neutronen mit den Protonen durch den Austausch elektrisch geladener Mesonen und zwar π -Mesonen und die Austauschwechselwirkung zwischen gleichen Nucleonen durch den Austausch elektrisch neutraler Mesonen von der gleichen Masse erfolgt. Weiterhin nehmen wir an, dass der nur von der gegenseitigen Entfernung der Nucleonen abhängige Anteil der Wechselwirkung zwischen Neutronen-Protonen, Neutronen-Neutronen und Protonen-Protonen gleich sei, d. h. wir setzen

$$J_{np} = J_{nn} = J_{pp} = J = \gamma \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/r_0}, \quad (47)$$

wo $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ die gegenseitige Entfernung der betreffenden beiden Nucleonen und γ eine Konstante von der Dimension einer Energie mal Länge bezeichnet; r_0 ist ebenfalls eine Konstante und zwar ergibt sich aus der Yukawaschen Theorie, dass man r_0 mit der durch 2π dividierten Comptonschen Wellenlänge der π -Mesonen gleichzusetzen hat. Wenn wir für die Masse der π -Mesonen, M_π , den Wert von 285 Elektronenmassen setzen¹³, so ist

$$r_0 = \frac{h}{2\pi M_\pi c} = 1,355 \cdot 10^{-13} \text{ cm}, \quad (48)$$

wo c die Lichtgeschwindigkeit bezeichnet. Über die einstweilen nicht näher definierte Konstante γ werden wir später verfügen.

Es sei hier erwähnt, dass in den bisherigen Anwendungen der statistischen Theorie auf Atomkerne für die Wechselwirkungsenergie zweier Nucleonen fast ausschliesslich die Ansätze

$$J = -\varepsilon e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/\tau_0} \quad (49)$$

und

$$J = -\varepsilon e^{-(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/\tau_0)^2} \quad (50)$$

gemacht wurden, wo ε eine Konstante von der Dimension einer Energie und τ_0 wieder eine Länge von der Grössenordnung 10^{-13} cm bezeichnet.

Ausser der hier besprochenen Wechselwirkung der Nucleonen besteht zwischen den Protonen noch eine Coulombsche elektrostatische Wechselwirkung zufolge der elektrischen Ladung der Protonen. Diese Wechselwirkung setzt sich bekannterweise ebenfalls aus einer paarweisen Wechselwirkung der Teilchen zusammen, ganz ähnlich wie wir dies bei der vorhin behandelten Nucleonenwechselwirkung vorausgesetzt und im Ansatz (24) formelmässig zum Ausdruck gebracht haben. Während sich in dieser Beziehung die beiden Wechselwirkungen gleich verhalten, besteht in einer anderer Beziehung ein wesentlicher Unterschied, während nämlich die oben behandelte Wechselwirkung zwischen gleichen Nucleonen als spinabhängig vorausgesetzt werden musste, ist die elektrostatische Coulombsche Wechselwirkung der Protonen spinunabhängig. Dementsprechend tritt dann hier nicht nur die Austauschenergie, sondern auch die gewöhnliche Wechselwirkungsenergie der Teilchen auf. Zur Berechnung der Coulombschen Wechselwirkungsenergie hat man im Ausdruck (25) für P_{ik} die Coulombsche Wechselwirkungsenergie zweier Protonen $e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ zu setzen, wo e die positive Elementarladung bezeichnet. Man erhält so für die gewöhnliche elektrostatische Coulombsche Wechselwirkungsenergie der Protonen

$$W_C = \frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \iint |\psi_i(\mathbf{q}_p)|^2 |\psi_k(\mathbf{q}_p)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}'_p|} d\tau_p d\tau'_p \quad (51)$$

und für die aus der elektrostatischen Wechselwirkung resultierende Austauschenergie

$$W_R = -\frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \iint \psi_k^*(\mathbf{q}_p) \psi_i^*(\mathbf{q}'_p) \psi_i(\mathbf{q}_p) \psi_k(\mathbf{q}'_p) \frac{1}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}'_p|} d\tau_p d\tau'_p. \quad (52)$$

Mit der Annahme (28) folgt für W_C der Ausdruck

$$W_C = \frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{k \neq i}^{Q_p} \iint |w_i(\mathbf{r}_p)|^2 |w_k(\mathbf{r}'_p)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}'_p|} dv_p dv'_p. \quad (53)$$

Bei W_R ergibt sich mit der Annahme (28), dass nur diejenigen Integrale nicht

verschwinden, in denen die Integration auf Zustände mit parallelem Spin auszudehnen ist. Man erhält

$$\mathcal{W}_R = -\frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{\substack{k \neq i \\ \sigma_k = \sigma_i}}^{Q_p} \iint w_k^*(\mathbf{r}_p) w_i^*(\mathbf{r}'_p) w_i(\mathbf{r}_p) w_k(\mathbf{r}'_p) \frac{1}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}'_p|} dv_p dv_{p'}, \quad (54)$$

wo die Doppelsumme nur auf je solche zwei Zustände auszudehnen ist, die parallelen Spin besitzen. Dass in \mathcal{W}_R im Gegensatz zu \mathcal{W}_A^{pp} (oder \mathcal{W}_A^{nn}) die Austauschwechselwirkung nur aus der Wechselwirkung von Teilchen mit parallelem Spin resultiert, folgt daraus, dass die Coulombsche Wechselwirkung im Gegensatz zu der Nucleonenwechselwirkung P_{ik} bzw. N_{ik} spinunabhängig ist.

Hiermit sind wir im Besitz der wellenmechanischen Ausdrücke der Wechselwirkungsenergien zwischen den Nucleonen. Über die gewöhnliche Coulombsche Wechselwirkungsenergie \mathcal{W}_C ist nichts weiteres zu sagen; wir müssen uns jedoch noch mit der Berechnung der Austauschenergie, insbesondere der Austauschenergie eines freien Nucleonengases ausführlich befassen.

Hierbei sei erwähnt, dass wir bis jetzt noch nicht gezeigt haben, wie durch die Austauschwechselwirkung der Absättigungscharakter der Kernkräfte zum Ausdruck kommt; wir kommen hierauf im übernächsten Paragraphen zu sprechen, wo wir dies an Hand von expliziten Ausdrücken der Austauschenergie leicht zeigen können.

§ 5. Wechselwirkungsenergie eines Nucleonengases

Wir befassen uns in diesem Paragraphen mit der expliziten Berechnung der Wechselwirkungsenergie der Teilchen des schon im vorangehenden behandelten freien Nucleonengases, das aus Q_n Neutronen und Q_p Protonen besteht und sich in einem Volumen Ω befindet. Wir setzen wieder voraus, dass sich das Gas am absoluten Nullpunkt der Temperatur, d. h. im tiefsten Energiezustand befindet. Dies bedeutet, dass jeder Neutronen-Bewegungszustand durch je 2 Neutronen mit antiparallelem Spin und jeder Protonen-Bewegungszustand ebenfalls durch je 2 Protonen mit antiparallelem Spin besetzt ist.¹⁴ Den k -ten Bewegungszustand eines freien Neutrons oder Protons können wir bzw. durch die ebenen Wellen

$$u_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{2\pi i}{h}(\mathbf{p}_k, \mathbf{r})}, \quad w_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{\frac{2\pi i}{h}(\mathbf{p}_k, \mathbf{r})} \quad (55)$$

beschreiben, wo \mathbf{p}_k den Impulsvektor des Neutrons bzw. Protons bezeichnet. Diese Wellenfunktionen erfüllen die Randbedingungen, wonach die Eigenfunktionen an den Berandungsflächen des Volumens Ω verschwinden müssen, nicht. Wenn man aber annimmt dass Ω sehr gross ist, so kann man diese Randbedingungen schon durch eine kleine Modifikation der Wellenfunktionen erfüllen, indem

man die Wellenfunktionen über einen infinitesimalen Bereich des Ausbreitungsvektors integriert, wodurch erreicht werden kann, dass die Wellenfunktionen im Unendlichen verschwinden. Weiterhin müssen die Eigenfunktionen der verschiedenen Neutronenzustände unter sich, sowie die der verschiedenen Protonenzustände unter sich orthogonal sein. Dies wird in unserer hier folgenden Betrachtungsweise z. B. für Neutronen dadurch zum Ausdruck gebracht, dass den Impulsvektoren p_i und p_k im Phasenraum verschiedene Zellen des Impulsraumes entsprechen müssen.

Zur Berechnung der Austauschenergie W_A unseres freien Nucleonengases führen wir der Einfachheit halber die folgenden Bezeichnungen ein

$$\varrho_{ik}^{np}(\tau) = u_i^*(\tau)w_k(\tau), \quad \varrho_{ik}^{nn}(\tau) = u_i^*(\tau)u_k(\tau), \quad \varrho_{ik}^{pp}(\tau) = w_i^*(\tau)w_k(\tau). \quad (56)$$

Mit diesen kann man ε_{ik}^{np} , ε_{ik}^{nn} und ε_{ik}^{pp} in folgender Form schreiben

$$\varepsilon_{ik}^{np} = \iint \varrho_{ik}^{np}(\tau) \varrho_{ik}^{np*}(\tau') J(|\tau - \tau'|) dv dv', \quad (57)$$

$$\varepsilon_{ik}^{nn} = \iint \varrho_{ik}^{nn}(\tau) \varrho_{ik}^{nn*}(\tau') J(|\tau - \tau'|) dv dv', \quad (58)$$

$$\varepsilon_{ik}^{pp} = \iint \varrho_{ik}^{pp}(\tau) \varrho_{ik}^{pp*}(\tau') J(|\tau - \tau'|) dv dv'. \quad (59)$$

Zur Berechnung von W_A haben wir diese drei Integrale auszuwerten, indem wir in die Übergangsdichten ϱ_{ik}^{np} , ϱ_{ik}^{nn} und ϱ_{ik}^{pp} ebene Wellen von der Form (55) einsetzen.

Wir beginnen mit der Berechnung von ε_{ik}^{np} , d. h. der Austauschenergie des i -ten Neutrons und k -ten Protons, die sich mit Rücksicht auf (47) in folgender Form schreiben lässt

$$\varepsilon_{ik} = -\gamma \iint \varrho_{ik}^{np}(\tau) \varrho_{ik}^{np*}(\tau') \frac{e^{-|\tau - \tau'|/r_0}}{|\tau - \tau'|} dv dv' \quad (60)$$

mit

$$\varrho_{ik}^{np}(\tau) = \frac{1}{\Omega} e^{\frac{2\pi i}{h}(\mathbf{p}_k - \mathbf{p}_i, \tau)} \quad (61)$$

Man kann nun

$$V_{ik}(\tau) = \int \varrho_{ik}^{np*}(\tau') \frac{e^{-|\tau - \tau'|/r_0}}{|\tau - \tau'|} dv' \quad (62)$$

als das Potential der Verteilung $\varrho_{ik}^{np*}(\tau)$ betrachten und mit Hilfe dieses Potentials ε_{ik}^{np} in der Form

$$\varepsilon_{ik}^{np} = -\gamma \int \varrho_{ik}(\tau) V_{ik}(\tau) dv \quad (63)$$

darstellen.

Die Berechnung des Potentials V_{ik} ist sehr einfach. Ganz ähnlich nämlich wie das Potential einer räumlichen elektrischen Ladungsverteilung mit Coulombschen Kräften die Poissonsche Gleichung erfüllt, genügt das Potential V_{ik} der

Verteilung q_{ik}^{np*} mit Yukawaschen Kräften der erweiterten Poissonschen Gleichung von der Form

$$\Delta V_{ik} - \frac{1}{r_0^2} V_{ik} = -4\pi q_{ik}^{np*}. \quad (64)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$V_{ik}(r) = \frac{h^2}{\Omega\pi} \frac{1}{p_0^2 + |\mathfrak{p}_i - \mathfrak{p}_k|^2} q_{ik}^{np*} \quad (65)$$

mit

$$p_0 = \frac{h}{2\pi} \frac{1}{r_0}. \quad (66)$$

Nach Einsetzen von (65) in (63) folgt

$$\varepsilon_{ik}^{np} = -\frac{\gamma h^2}{\Omega\pi} \frac{1}{p_0^2 + |\mathfrak{p}_i - \mathfrak{p}_k|^2}. \quad (67)$$

Die aus der Austauschwechselwirkung der Neutronen und Protonen resultierende gesamte Austauschenergie W_A^{np} erhält man nach (45) in der Weise, dass man ε_{ik}^{np} über alle vollbesetzten Neutronen- und Protonenzustände, d. h. über alle Neutronenimpulse \mathfrak{p}_i und Protonenimpulse \mathfrak{p}_k summiert.

Die Herleitung des Ausdrucks für ε_{ik}^{np} erfolgte im vorangehenden Paragraphen auf Grund der Wellenmechanik, die Berechnung von W_A^{np} , d. h. die Summation über die Neutronen- und Protonenimpulse, führen wir auf statistischen Grundlagen durch. Dies bedeutet, dass wir die Summation über \mathfrak{p}_i und \mathfrak{p}_k durch eine Integration ersetzen, was folgendermassen geschehen kann. Wenn wir den Betrag von \mathfrak{p}_i und \mathfrak{p}_k mit p_i bzw. p_k und den Winkel zwischen \mathfrak{p}_i und \mathfrak{p}_k mit ϑ bezeichnen, dann ist

$$|\mathfrak{p}_i - \mathfrak{p}_k|^2 = p_i^2 + p_k^2 - 2p_i p_k \cos \vartheta. \quad (68)$$

Wir führen ein Polarkoordinatensystem ein, als dessen Achse wir \mathfrak{p}_i wählen. Die Anzahl der Neutronen, deren Impulsrichtung zwischen ϑ und $\vartheta + d\vartheta$ und deren Impulsbetrag zwischen p_i und $p_i + dp_i$ liegt, ist

$$dn = \frac{4\pi\Omega}{h^3} p_i^2 \sin \vartheta dp_i d\vartheta. \quad (69)$$

Somit lässt sich die Summation über \mathfrak{p}_i durch die folgende Integration ersetzen

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{Q_n} \varepsilon_{ik}^{np} &= -\frac{4\gamma}{h} \int_0^{p_{\mu n}} dp_i p_i^2 \int_0^\pi \frac{\sin \vartheta d\vartheta}{p_0^2 + p_i^2 + p_k^2 - 2p_i p_k \cos \vartheta} = \\ &= -\frac{2\gamma}{h} \left[\frac{1}{2p_k} (p_{\mu n}^2 - p_k^2 - p_0^2) \ln \frac{(p_{\mu n} + p_k)^2 + p_0^2}{(p_{\mu n} - p_k)^2 + p_0^2} + \right. \\ &\quad \left. + 2p_{\mu n} - 2p_0 \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{p_{\mu n} + p_k}{p_0} - 2p_0 \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{p_{\mu n} - p_k}{p_0} \right], \end{aligned} \quad (70)$$

wo $p_{\mu n}$ den Betrag des maximalen Impulses der Neutronen bezeichnet. Dieser Ausdruck gibt die Austauschenergie aller Q_n Neutronen mit dem Proton mit dem Impuls p_k . Die gesamte Energie, die aus der Austauschwechselwirkung der Q_n Neutronen mit allen Q_p Protonen resultiert, erhält man, wenn man diesen Ausdruck noch über die Protonenimpulse p_k summiert. Diese Summierung ersetzen wir wieder durch eine Integration. Hierzu haben wir den Ausdruck auf der rechten Seite in (70) mit $8\pi\Omega p_k^2/h^3$ zu multiplizieren und über p_k von 0 bis zu $p_{\mu p}$ zu integrieren, wo $p_{\mu p}$ den Betrag des maximalen Impulses der Protonen bezeichnet. Nach einer ziemlich mühsamen Integration ergibt sich

$$\begin{aligned}
 W_A^{np} &= \sum_{i=1}^{Q_n} \sum_{k=1}^{Q_p} \varepsilon_{ik}^{np} = -\frac{16\pi\gamma\Omega}{h^4} \int_0^{p_{\mu p}} \left[2p_{\mu n} + \frac{1}{2p_k} (p_{\mu n}^2 - p_k^2 + p_0^2) \ln \frac{p_0^2 + (p_{\mu n} + p_k)^2}{p_0^2 + (p_{\mu n} - p_k)^2} \right. \\
 &\quad \left. - 2p_0 \operatorname{arctg} \frac{p_{\mu n} + p_k}{p_0} - 2p_0 \operatorname{arctg} \frac{p_{\mu n} - p_k}{p_0} \right] p_k^2 dp_k = \\
 &= -\frac{16\pi\gamma\Omega}{h^4} \left\{ \frac{1}{2} (p_{\mu n}^3 p_{\mu p} + p_{\mu n} p_{\mu p}^3) - \frac{1}{6} p_0^3 p_{\mu n} p_{\mu p} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{24} [p_0^4 + 6p_0^2 (p_{\mu n}^2 + p_{\mu p}^2) - 3(p_{\mu n}^2 - p_{\mu p}^2)^2] \ln \frac{p_0^2 + (p_{\mu n} + p_{\mu p})^2}{p_0^2 + (p_{\mu n} - p_{\mu p})^2} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{2}{3} p_0 (p_{\mu n}^3 + p_{\mu p}^3) \operatorname{arctg} \frac{p_{\mu n} + p_{\mu p}}{p_0} + \frac{2}{3} p_0 (p_{\mu n}^3 - p_{\mu p}^3) \operatorname{arctg} \frac{p_{\mu n} - p_{\mu p}}{p_0} \right\}.
 \end{aligned} \quad (71)$$

Wenn wir die dimensionslosen Funktionen

$$\omega_n = \frac{p_{\mu n}}{p_0} = (3\pi^2)^{1/3} r_0 \varrho_n^{1/3} \quad \text{und} \quad \omega_p = \frac{p_{\mu p}}{p_0} = (3\pi^2)^{1/3} r_0 \varrho_p^{1/3} \quad (72)$$

eingeführen, so lässt sich W_A^{np} in folgender Form schreiben

$$\begin{aligned}
 W_A^{np} &= -\frac{\gamma\Omega}{r_0^4} \frac{1}{6\pi^2} \left\{ 3(\omega_n^3 \omega_p + \omega_n \omega_p^3) - \omega_n \omega_p + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{4} [1 + 6(\omega_n^2 + \omega_p^2) - 3(\omega_n^2 - \omega_p^2)^2] \{ \ln [1 + (\omega_n + \omega_p)^2] - \ln [1 + (\omega_n - \omega_p)^2] \} - \right. \\
 &\quad \left. - 4(\omega_n^3 + \omega_p^3) \operatorname{arctg} (\omega_n + \omega_p) + 4(\omega_n^3 - \omega_p^3) \operatorname{arctg} (\omega_n - \omega_p) \right\}. \quad (73)
 \end{aligned}$$

Die Berechnung von W_A^{nn} und W_A^{pp} erfolgt auf eine ganz ähnliche Weise. Zunächst berechnet man auch hier ε_{ik}^{nn} und ε_{ik}^{pp} , für die sich formal derselbe Ausdruck ergibt, wie für $\frac{1}{2} \varepsilon_{ik}^{np}$ [man vgl. (67)], jedoch mit dem wesentlichen Unterschied, dass im Ausdruck von ε_{ik}^{nn} alle beide Impulse, p_i und p_k , Neutronenimpulse und im Ausdruck von ε_{ik}^{pp} Protonenimpulse bedeuten. Alles weitere

verläuft ganz analog zur Berechnung von W_A^{np} , nur hat man im Fall von W_A^{nn} bei den Integrationen über p_i und p_k beidesmal von 0 bis $p_{\mu n}$ und im Fall von W_A^{pp} beidesmal von 0 bis $p_{\mu p}$ zu integrieren. Es ergibt sich mit Rücksicht auf (45)

$$W_A^{nn} = -\frac{4\pi\gamma\Omega}{h^4} \left[p_{\mu n}^4 - \frac{1}{6} p_0^2 p_{\mu n}^2 + \frac{1}{24} (p_0^4 + 12 p_0^2 p_{\mu n}^2) \ln \frac{p_0^2 + 4 p_{\mu n}^2}{p_0^2} - \frac{4}{3} p_0 p_{\mu n}^3 \operatorname{arctg} \frac{2 p_{\mu n}}{p_0} \right], \quad (74)$$

$$W_A^{pp} = -\frac{4\pi\gamma\Omega}{h^4} \left[p_{\mu p}^4 - \frac{1}{6} p_0^2 p_{\mu p}^2 + \frac{1}{24} (p_0^4 + 12 p_0^2 p_{\mu p}^2) \ln \frac{p_0^2 + 4 p_{\mu p}^2}{p_0^2} - \frac{4}{3} p_0 p_{\mu p}^3 \operatorname{arctg} \frac{2 p_{\mu p}}{p_0} \right]. \quad (75)$$

Wenn man auch hier die dimensionslosen Funktionen ω_n und ω_p einführt, so erhält man

$$W_A^{nn} = -\frac{\gamma\Omega}{r_0^4} \frac{1}{24\pi^3} \left[6\omega_n^4 - \omega_n^2 + \frac{1}{4} (1 + 12\omega_n^2) \ln(1 + 4\omega_n^2) - 8\omega_n^3 \operatorname{arctg} 2\omega_n \right], \quad (76)$$

$$W_A^{pp} = -\frac{\gamma\Omega}{r_0^4} \frac{1}{24\pi^3} \left[6\omega_p^4 - \omega_p^2 + \frac{1}{4} (1 + 12\omega_p^2) \ln(1 + 4\omega_p^2) - 8\omega_p^3 \operatorname{arctg} 2\omega_p \right]. \quad (77)$$

All' dies gilt nur für ein freies Nucleonengas, d. h. für den Fall, dass die Dichteverteilung der Nucleonen konstant ist. Für ein nicht freies Nucleonengas kann man die Austauschenergie auf ähnliche Weise berechnen, wie wir dies im Fall der Fermischen kinetischen Energie (15) eines nicht freien Nucleonengases getan haben. Wir unterteilen also mit einem System von Scheidewänden das Volumen des Gases in Teilvolumina dv , in denen sich noch viele Neutronen und Protonen befinden, die man als ein freies Nucleonengas, d. h. als ein Nucleonengas mit konstanter Dichte betrachten kann. Die Austauschenergie der Nucleonen in den einzelnen Teilvolumina lässt sich in der Form (73), (76) und (77) darstellen mit dem Unterschied, dass statt Ω überall dv steht. Die gesamte Austauschenergie erhält man also durch eine Integration über das ganze vom Nucleonengas beanspruchte Volumen. Wenn man zur Abkürzung die Bezeichnung

$$f(\omega_n, \omega_p) = \frac{1}{24\pi^3} \left\{ 3(\omega_n^3 \omega_p + \omega_n \omega_p^3) - \omega_n \omega_p + \frac{1}{4} [1 + 6(\omega_n + \omega_p)^2 - 3(\omega_n^2 - \omega_p^2)^2] \{ \ln[1 + (\omega_n + \omega_p)^2] - \ln[1 + (\omega_n - \omega_p)^2] \} - 4(\omega_n^3 + \omega_p^3) \operatorname{arctg}(\omega_n + \omega_p) + 4(\omega_n^3 - \omega_p^3) \operatorname{arctg}(\omega_n - \omega_p) \right\} \quad (78)$$

eingeführt, so ergibt sich

$$W_A^{np} = -\frac{4\gamma}{r_0^4} \int f(\omega_n, \omega_p) dv, \quad (79)$$

$$W_A^{nn} = -\frac{\gamma}{r_0^4} \int f(\omega_n, \omega_n) dv, \quad (80)$$

$$W_A^{pp} = -\frac{\gamma}{r_0^4} \int f(\omega_p, \omega_p) dv. \quad (81)$$

Während in (45) im Ausdruck von W_A^{pp} und W_A^{np} die aus dem Selbsttausch der Neutronen bzw. Protonen resultierenden Glieder durch Ausschliessen der Glieder $k = i$ in den Doppelsummen eliminiert sind, enthalten (80) und (81) sowie die entsprechenden vorangehenden Ausdrücke auch die aus dem Selbsttausch resultierende Energie, da in beiden Fällen über dasselbe Impulsintervall zweimal integriert wird. Mangels eines genaueren Verfahrens zur Korrektur des Selbsttauschs kann man so vorgehen, dass man die aus dem Selbsttausch eines Neutrons oder Protons resultierende Energie der mittleren Austauschenergie eines Neutrons bzw. Protons, d. h. W_A^{nn}/Q_n bzw. W_A^{pp}/Q_p gleichsetzt. Die aus dem Selbsttausch aller Neutronen und Protonen resultierende Energie ist also W_A^{nn}/Q_n bzw. W_A^{pp}/Q_p . Zur Korrektur des Selbsttauschs hat man also diese Energien von (80) bzw. (81) in Abzug zu bringen, d. h. die Korrektur des Selbsttauschs besteht darin, dass man die Ausdrücke (80) und (81) einfach mit den Faktoren $s_n = 1 - \frac{1}{Q_n}$ bzw. $s_p = 1 - \frac{1}{Q_p}$ multipliziert. Man erhält also für die gesamte Austauschenergie

$$W_A = W_A^{np} + s_n W_A^{nn} + s_p W_A^{pp}. \quad (82)$$

Allerdings ist die auf diese Weise durchgeführte Korrektur sehr grob, es sei jedoch hervorgehoben, dass die Korrektur für den Fall $Q_n = 1$ und $Q_p = 1$, wo die Korrektur relativ am grössten ist, den exakten Wert liefert, da in diesem Fall die Korrekturfaktoren s_n und s_p gleich 0 sind und somit auch die korrigierten Ausdrücke $s_n W_A^{nn}$ und $s_p W_A^{pp}$ verschwinden, wie dies auch sein muss. Für grössere Teilchenzahlen liefert die Korrektur nur einen groben Näherungswert, was aber ziemlich belanglos ist, denn — wie man sieht — wird die Korrektur von umso geringerer Bedeutung, je grösser die Teilchenzahl ist.

Wir geben hier noch für die Wechselwirkungsenergien (49) und (50) die Funktion $f(\omega_n, \omega_p)$ an. Im Falle der Wechselwirkungsenergie (49) ist

$$f(\omega_n, \omega_p) = \frac{r_0}{24\pi^3} \left\{ 4\omega_n \omega_p - [1 + 3(\omega_n^2 + \omega_p^2)] \left\{ \ln[1 + (\omega_n + \omega_p)^2] - \ln[1 + (\omega_n - \omega_p)^2] \right\} + \right. \\ \left. + 4(\omega_n^3 + \omega_p^3) \arctg(\omega_n + \omega_p) - 4(\omega_n^3 - \omega_p^3) \arctg(\omega_n - \omega_p) \right\} \quad (83)$$

und im Falle der Wechselwirkungsenergie (50) findet man

$$f(\omega_n, \omega_p) = \frac{r_0}{6\pi^{5/2}} \left[\frac{\pi^{1/2}}{2} (\omega_n^3 + \omega_p^3) \Phi\left(\frac{\omega_n + \omega_p}{2}\right) + (\omega_n^2 + \omega_p^2 - \omega_n \omega_p - 2) e^{-\left(\frac{\omega_n - \omega_p}{2}\right)^2} - \frac{\pi^{1/2}}{2} (\omega_n^3 - \omega_p^3) \Phi\left(\frac{\omega_n - \omega_p}{2}\right) - (\omega_n^2 + \omega_p^2 + \omega_n \omega_p - 2) e^{-\left(\frac{\omega_n - \omega_p}{2}\right)^2} \right], \quad (84)$$

wo $\Phi(x)$ die Gaussche Transzendent

$$\Phi(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^x e^{-u^2} du \quad (85)$$

bezeichnet.

Die Herleitung dieser Ausdrücke bzw. der Austauschenergien mit den Wechselwirkungsenergien (49) und (50) erfolgt auf einem etwas anderen Weg, als in dem von uns behandelten Fall einer Yukawaschen Wechselwirkung; die Berechnung von ε_{ik}^{np} kann in diesen Fällen durch die direkte Auswertung des Integrals (60) geschehen¹⁵. Für die Wechselwirkungsenergie (49) kann z. B. die Herleitung von W_A^{np} , W_A^{nn} , W_A^{pp} , wie aus einem Vergleich von (49) und (47) sofort zu sehen ist, auch so erfolgen, dass man die für die Yukawasche Wechselwirkung (47) hergeleiteten entsprechenden Ausdrücke (71), (76) und (77) nach $-1/r_0$ d. h. nach $-2\pi p_0/\hbar$ differenziert.

Die aus der elektrostatischen Coulombschen Wechselwirkung der Protonen resultierende Austauschenergie W_R lässt sich für freie Protonen mit Hilfe des Ausdrucks für ε_{ik}^{pp} einfach berechnen.¹⁶ Das Doppelintegral in (54), das wir der Kürze halber mit ε_{ik}^R bezeichnen, ist nämlich für Protonen mit parallelem Spin mit $2\varepsilon_{ik}^{pp}$ gleich, wenn man im Ausdruck von ε_{ik}^{pp} für die Konstanten γ und $1/r_0$ die Werte $\gamma = e^2$ und $1/r_0 = 0$, d. h. $p_0 = 0$ setzt. Es geht dann nämlich $J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ in die Coulombsche Wechselwirkungsenergie $e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ über. Es ergibt sich also für Protonen mit parallelem Spin

$$\varepsilon_{ik}^R = -\frac{e^2 \hbar^2}{\Omega \pi} \frac{1}{|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_k|^2}. \quad (86)$$

Für Protonen mit antiparallelem Spin ist $\varepsilon_{ik}^R = 0$.

Zur Berechnung von W_R hat man ε_{ik}^R über alle Protonenzustände mit parallelem Spin zu summieren. Die Summationen kann man ganz analog zur Berechnung von W_A^{pp} durch Integrationen ersetzen, wobei aber zu beachten ist, dass jetzt die Summation, d. h. Integration nur auf Protonenzustände mit parallelen Spin auszudehnen ist. Es ergibt sich¹⁷

$$W_R = -\frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^{Q_p} \sum_{\substack{k=1 \\ \sigma_k = \sigma_i}}^{Q_p} \varepsilon_{ik}^R = -\frac{4\pi e^2 \Omega}{\hbar^4} p_{\mu p}^4. \quad (87)$$

Wenn man auch hier statt $p_{\mu n}$ die dimensionslose Funktion ω_p einführt, so folgt für ein freies Protonengas

$$W_R = -\frac{e^2 \Omega}{r_0^4} \frac{1}{4\pi^3} \omega_p^4. \quad (88)$$

Für ein nicht freies Protonengas, d. h. für ein Protonengas mit beliebiger Dichteverteilung erhält man ganz ähnlich zu (79)–(81) den Ausdruck

$$W_R = -\frac{e^2}{r_0^4} \frac{1}{4\pi^3} \int \omega_p^4 dv. \quad (89)$$

Gerade so wie in (80) und (81), ist auch in diesem Ausdruck, aus denselben Gründen wie dort, die aus dem Selbstaustausch der Protonen resultierende Energie enthalten. Den hierdurch begangenen Fehler braucht man jedoch nicht eigenst zu korrigieren, sondern man kann so verfahren, dass man in den gewöhnlichen Coulombschen Energieausdruck W_C auch die der elektrostatischen Selbstwechselwirkung entsprechenden Glieder aufnimmt, was bei der statistischen Behandlungsweise sowieso nicht vermieden werden kann. Dies bedeutet, dass wir im Ausdruck (53) auch die Glieder mit $k = i$ aufnehmen, wodurch wir für ein beliebiges, d. h. sowohl freies als nicht freies Protonengas den Ausdruck

$$W_C = \frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^{Q_P} \sum_{k=1}^{Q_P} \iint |w_i(\mathbf{r})|^2 |w_k(\mathbf{r}')|^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv dv' = \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{\varrho_P(\mathbf{r}) \varrho_P(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv dv' \quad (90)$$

erhalten, wo gemäss der wellenmechanischen Definition der Teilchendichte

$$\sum_{i=1}^{Q_P} |w_i(\mathbf{r})|^2 = \varrho_P(\mathbf{r}) \quad (91)$$

gesetzt wurde. Die Glieder mit $k \neq i$ in W_C sind nämlich, abgesehen vom Vorzeichen, dieselben wie die Glieder mit $k = i$ in W_R , wie dies aus einem Vergleich mit (54) sofort zu sehen ist. Da ausserdem diese Glieder in W_C und W_R verschiedenes Vorzeichen haben, ergibt sich, dass sich diese Glieder in der Summe von W_C und W_R — und nur auf diese Summe kommt es im folgenden an — gerade kompensieren. Allerdings ist die Kompensation nur in den wellenmechanischen Ausdrücken vollkommen, in den statistischen Ausdrücken ist sie nur eine teilweise. Man kann sich jedoch damit vollkommen begnügen, da diese Selbstwechselwirkungsenergien sowieso nur für kleine Protonenzahlen von Bedeutung sind, für diese ist aber — wie sich zeigen wird — sowohl W_C als W_R im Verhältnis zu W_A unbedeutend.

Ergänzend zum Ausdruck (90) sei noch bemerkt, dass man W_C auch in der Form

$$W_C = \frac{1}{2} e \int V(\mathbf{r}) \varrho_P(\mathbf{r}) dv \quad (92)$$

schreiben kann, wo

$$V(\mathbf{r}) = e \int \frac{\varrho_P(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad (93)$$

das elektrostatische Potential der Protonen am Ort \mathbf{r} bezeichnet.

§ 6. Absättigungscharakter der Austauschkräfte

Bekanntlich ergibt sich aus dem empirischen Befund, dass die Energie der Kerne angenähert zur Nucleonenzahl proportional ist. Dies weist darauf hin, dass die zwischen den Nucleonen wirkenden Anziehungskräfte, gerade so wie die chemischen Valenzkräfte, eine Absättigung zeigen müssen, d. h., dass durch diese Kräfte von einem Nucleon nur eine beschränkte Anzahl von Nucleonen gebunden werden kann. Wir wollen nun hier zeigen, dass die im vorangehenden beschriebenen Austauschkräfte, im Gegensatz zu den gewöhnlichen Kräften, diesen Absättigungscharakter besitzen, und zwar wollen wir dies auf einem indirekten Weg tun, indem wir untersuchen, wie die Austauschenergie von der Teilchenzahl abhängt, wobei wir den Korrektionsfaktor s gleich 1 setzen können.

Wir ziehen hierzu den schon im vorangehenden behandelten Fall in Betracht, bei dem sich Q_n Neutronen und Q_p Protonen mit konstanter Dichteverteilung im Volumen Ω befinden. Wir wollen ausserdem noch die Vereinfachung machen, dass die Anzahl der Neutronen und Protonen gleich gross ist, d. h. dass $Q_n = Q_p = Q/2$ ist, wo Q die Gesamtzahl der Nucleonen ist. Mit diesen Vereinfachungen wird

$$\varrho_n = \varrho_p = \frac{1}{2} \varrho = \frac{Q}{2\Omega} \quad \text{und} \quad \omega_n = \omega_p = \omega = \left(\frac{3\pi^2 r_0^3}{2} \right)^{1/3} \left(\frac{Q}{\Omega} \right)^{1/3}, \quad (94)$$

wo ϱ die gesamte Nucleondichte bezeichnet.

Für die Austauschenergie der Nucleonen ergibt sich aus (73), (76) und (77) mit Rücksicht auf (94)

$$\begin{aligned} W_A &= W_A^{np} + W_A^{nn} + W_A^{pp} = -\frac{6\gamma}{r_0^4} f(\omega, \omega) \Omega = \\ &= -\frac{3}{8\pi} \frac{\gamma}{r_0} Q \left[6\omega - \frac{1}{\omega} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\omega^3} + \frac{12}{\omega} \right) \ln(1 + 4\omega^2) - 8 \operatorname{arctg} 2\omega \right]. \end{aligned} \quad (95)$$

Wie man aus diesem Ausdruck sieht, wird für grosse ω

$$W_A \approx -\frac{9}{4} \frac{\gamma}{r_0} Q \omega. \quad (96)$$

W_A ist also für grosse ω zu $Q\omega$ proportional. Da sich weiterhin ω wegen der hier konstanten Dichte zu $Q^{1/3}$ als proportional erweist, folgt, dass W_A zu $Q^{4/3}$ proportional ist.

Während sich also die gewöhnliche Wechselwirkungsenergie der Nucleonen zu ϱ^2 , d. h. zu Q^2 als proportional ergibt, ist W_A nur zur $4/3$ -ten Potenz von Q proportional. Hierin kommt der Absättigungscharakter der Austauschkräfte zum Ausdruck. Allerdings ist hier die Absättigung keine vollkommene, denn bei einer vollständigen Absättigung der Wechselwirkungskräfte müsste die Wechsel-

wirkungsenergie zur Teilchenzahl, d. h. zu Q proportional sein, während sich in unserem Fall eine Proportionalität zu $Q^{4/3}$ ergibt. Dies ist eine Folge dessen, dass wir die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Nucleonen in der Form (47) angesetzt haben, wenn wir diese Wechselwirkungsenergie in der Form (49) oder (50) ansetzen würden, dann ergäbe sich für $\omega \gg 1$ die Austauschenergie zu Q als proportional,¹⁸ die Absättigung wäre also in diesen Fällen für $\omega \gg 1$ vollständig.

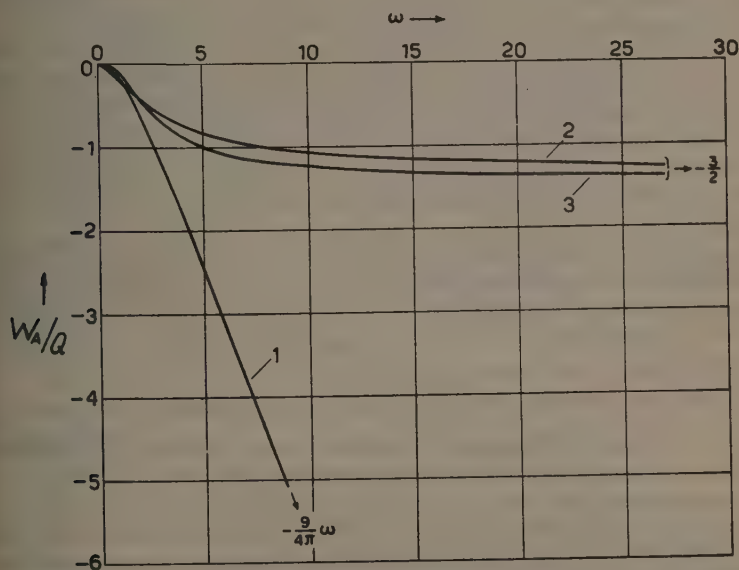


Fig. 1. Die auf ein Teilchen entfallende Austauschenergie W_A/Q eines Nucleonengases mit konstanter Dichte als Funktion von ω .

Kurve 1: W_A/Q aus (95) berechnet in γ/r_0 -Einheiten,

Kurve 2: W_A/Q aus (97) berechnet in ε -Einheiten,

Kurve 3: W_A/Q aus (98) berechnet in ε -Einheiten.

Dies kann leicht gezeigt werden. Wir brauchen hierzu nur die dem Ausdruck (95) entsprechende gesamte Austauschenergie W_A für die Wechselwirkungsenergien (49) und (50) anzugeben. Mit Hilfe von (83) und (84) ergibt sich mit den Vereinfachungen (94) im Falle der Wechselwirkungsenergie (49)

$$W_A = -\frac{3}{8\pi} \varepsilon Q \left[\frac{4}{\omega} - \left(\frac{1}{\omega^3} + \frac{6}{\omega} \right) \ln(1 + 4\omega^2) + 8 \operatorname{arctg} 2\omega \right] \quad (97)$$

und im Falle der Wechselwirkungsenergie (50)

$$W_A = -\frac{3}{2\pi^{1/2}} \varepsilon Q \left[\pi^{1/2} \Phi(\omega) + \left(\frac{1}{\omega} - \frac{2}{\omega^3} \right) e^{-\omega^2} - \frac{3}{\omega} + \frac{2}{\omega^3} \right]. \quad (98)$$

Für grosse ω gehen diese Ausdrücke der Reihe nach asymptotisch in die folgenden über

$$W_A \simeq -\frac{3}{8\pi} \varepsilon Q \quad 8 \arctg 2\omega \simeq -\frac{3}{2} \varepsilon Q, \quad (99)$$

$$W_A \simeq -\frac{3}{2\pi^{1/2}} \varepsilon Q \pi^{1/2} \Phi(\omega) \simeq -\frac{3}{2} \varepsilon Q. \quad (100)$$

In beiden Fällen ist also W_A für sehr grosse ω zu Q proportional.

W_A/Q als Funktion von ω ist für die Ausdrücke (95), (99) und (100) in Fig. 1 dargestellt, die die Verhältnisse deutlich veranschaulicht.

Im Verhalten für grosse ω besteht also ein wesentlicher Unterschied zwischen den Wechselwirkungsenergien (49) und (50) einerseits und der von uns zu Grunde gelegten Yukawaschen Wechselwirkungsenergie (47) andererseits und es dürfte zum Teil auf diesem Unterschied beruhen, dass die im weiteren Verlauf dieser Arbeit durchzuführenden Berechnungen zu befriedigenderen Resultaten führen, als die bisher mit den erwähnten anderen Wechselwirkungsenergien erzielten Resultate.

Die Ursache dieses verschiedenen asymptotischen Verhaltens der Wechselwirkungsenergien liegt offenbar darin, dass für $|\tau - \tau'| = 0$ die Wechselwirkungsenergien (49) und (50) in eine Konstante übergehen, während die Yukawasche Wechselwirkungsenergie (47) wie $1/|\tau - \tau'|$ unendlich wird.

7. Das statistische Modell des Atomkerns

Die statistische Theorie des Atomkerns gründet sich auf die Annahme dass man die Nucleonen des Kerns als ein entartetes Neutronen- und Protonengas am absoluten Nullpunkt der Temperatur betrachten kann. Es wird angenommen, dass in diesem Nucleonengas die Teilchen kontinuierlich verteilt sind man betrachtet also die Teilchen als pulverisiert. Das Nucleonengas wird durch die in den beiden vorangehenden Paragraphen ausführlich besprochenen Austauschenergien des Nucleonen zusammengehalten; die Abstossungsenergien die der Anziehung des Gleichgewicht halten, sind die im § 3 besprochenen kinetischen Energien des Nucleonengases und die im § 4 und am Ende des § 5 behandelte Coulombsche Wechselwirkungsenergie der Protonen. Dem Wesen der statistischen Betrachtungsweise entsprechend werden im statistischen Kernmodell die individuellen Eigenschaften der Nucleonen verwischt. Aus den Grundannahmen der Theorie folgt weiterhin, dass man die Theorie nur auf solche Kerne anwenden kann, in welchen die Anzahl der Neutronen und Protonen gross, also die statistische Behandlungsweise gerechtfertigt ist.

Wir ziehen im folgenden einen Kern in Betracht, der N Neutronen und Z Protonen enthält. Die Gesamtzahl der Nucleonen im Kern, d. h. die Massenzahl bezeichnen wir mit A ; es ist also

$$A = N + Z. \quad (10)$$

Zufolge der im vorangehenden schon besprochenen Korrekturen, die wir an der Fermischen kinetischen Energie und der Austauschenergie gleicher Teilchen angebracht haben, können wir die Beschränkung auf schwere Kerne fallen lassen und auch leichte Kerne in unsere Betrachtungen aufnehmen.

Das Grundproblem besteht in der Bestimmung der Energie des Kerns und in der Dichteverteilung der Nucleonen im Kern. Die Lösung dieses Problems kann mit Hilfe eines Variationsprinzips geschehen. Zu diesem Variationsprinzip gelangt man, indem man den Energieausdruck des Kerns bildet. Zur Herleitung dieses Energieausdruckes führen wir ein System von Scheidewänden ein, mit denen wir das Nucleonengas, ganz ähnlich wie in den Paragraphen 3 und 5, in Teilvolumina dv unterteilen und zwar in der Weise, dass jedes räumliche Volumenelement noch viele Neutronen und Protonen enthalte, die man als ein freies Neutronen- bzw. Protonengas betrachten kann. Von der Schwierigkeit, dass diese Bedingung in den vom Kernmittelpunkt weit entfernten Gebieten — wegen der kleinen Nucleonenzahl — nicht erfüllbar ist, können wir zunächst absehen, da diese Gebiete bei der Berechnung der uns in erster Linie interessierenden Kernenergie von geringer Bedeutung sind. Die einzelnen Energieanteile des Kerns können wir mit Hilfe der in den Paragraphen 3 und 5 erhaltenen Resultate sofort angeben. Bevor wir dies tun, machen wir noch einige zum Teil vereinfachende allgemeine Festsetzungen.

Bei der Berechnung der Energie ist es vorteilhaft alle Energieanteile in derselben Energieeinheit auszudrücken. Wir setzen $g = 4e$ und wählen als Energieeinheit

$$\varepsilon_0 = \frac{g^2}{r_0} = 2,724 \cdot 10^{-5} \text{ erg} = 17,01 \text{ MeV}. \quad (102)$$

Dies ist praktisch das Doppelte des mittleren Packungsanteils.

Weiterhin wollen wir den Ausdruck für die Fermische kinetische Energie und die Ausdrücke für die Austauschenergie gleicher Teilchen vereinfachen, indem wir für die Korrekturfaktoren k_n , k_p sowie s_n und s_p die folgenden Vereinfachungen durchführen. Diese Korrekturfaktoren sind nur für leichte Kerne von Bedeutung. Bei den stabilsten leichten Kernen ist nun $N = Z = A/2$. Wir können daher bei der Energieberechnung der stabilsten leichten Kerne

$$\text{für } A \geq 4 \quad k_n = k_p = k = 1 - \frac{4}{A}, \quad (103)$$

$$\text{für } A < 4 \quad k_n = k_p = k = 0, \quad (104)$$

sowie

$$\text{für } A \geq 2 \quad s_n = s_p = s = 1 - \frac{2}{A}, \quad (105)$$

$$\text{für } A < 2 \quad s_n = s_p = s = 0 \quad (106)$$

setzen. Diese vereinfachten Korrekturfaktoren k und s können wir auch für die schweren Kerne, für die $N \neq Z$ ist, beibehalten, denn bei diesen ist die

ganze Korrektur unbedeutend. Die Fälle $A < 4$ bzw. $A < 2$ sind nur der Vollständigkeit halber angegeben, praktisch kommt diesen keine Bedeutung zu, da es sich hier um eine statistische Theorie handelt, die bei diesen kleinen Teilchenzahlen versagt, und wir in unseren folgenden Berechnungen höchstens noch den schon sehr extremen Fall $A = 4$ aufnehmen können. Wir werden daher im folgenden einfach $k = 1 - \frac{4}{A}$ und $s = 1 - \frac{2}{A}$ setzen.

Schliesslich führen wir noch in den einzelnen Energieanteilen statt der Dichtefunktionen ϱ_n und ϱ_p durchweg die durch (72) definierten dimensionslosen Funktionen ω_n und ω_p ein.

Mit Berücksichtigung all' dieser Festsetzungen geben wir nun die einzelnen Energieanteile an. Wenn wir die Fermische kinetische Energie der Nucleonen mit E_K , die Weizsäckersche Inhomogenitätskorrektur der kinetischen Energie mit E_J , die aus der Neutron-Proton Wechselwirkung resultierende Austauschenergie mit E_A^{np} , die aus der Neutron-Neutron Wechselwirkung resultierende Austauschenergie mit E_A^{nn} , die aus der Proton-Proton Wechselwirkung resultierende Austauschenergie mit E_A^{pp} , die gewöhnliche elektrostatische Coulombsche Wechselwirkungsenergie der Protonen mit E_C und schliesslich die aus derselben Wechselwirkung resultierende Austauschenergie mit E_R bezeichnen, so ist

$$\begin{aligned} E_K &= k\kappa_K \int (\varrho_n^{5/3} + \varrho_p^{5/3}) dv = \frac{k\kappa_K}{(3\pi^2)^{5/3}r_0^3} \int (\omega_n^5 + \omega_p^5) dv = \\ &= \frac{k\mu_K}{(3\pi^2)^{5/3}r_0^3} \varepsilon_0 \int (\omega_n^5 + \omega_p^5) dv, \end{aligned} \quad (107)$$

$$\begin{aligned} E_J &= \kappa_J \int \left[\frac{1}{\varrho_n} \left(\frac{d\varrho_n}{dr} \right)^2 + \frac{1}{\varrho_p} \left(\frac{d\varrho_p}{dr} \right)^2 \right] dv = \frac{3\kappa_J}{\pi^2 r_0^3} \int \left[\omega_n \left(\frac{d\omega_n}{dr} \right)^2 + \omega_p \left(\frac{d\omega_p}{dr} \right)^2 \right] dv = \\ &= \frac{3\mu_J}{\pi^2 r_0^3} \varepsilon_0 \int \left[\omega_n \left(\frac{d\omega_n}{dr} \right)^2 + \omega_p \left(\frac{d\omega_p}{dr} \right)^2 \right] dv, \end{aligned} \quad (108)$$

$$E_A^{np} = -\frac{4\gamma}{r_0^4} \int f(\omega_n, \omega_p) dv = -\frac{4\lambda}{r_0^4} \varepsilon_0 \int f(\omega_n, \omega_p) dv, \quad (109)$$

$$E_A^{nn} = -\frac{\gamma s}{r_0^4} \int f(\omega_n, \omega_n) dv = -\frac{\lambda s}{r_0^4} \varepsilon_0 \int f(\omega_n, \omega_n) dv, \quad (110)$$

$$E_A^{pp} = -\frac{\gamma s}{r_0^4} \int f(\omega_p, \omega_p) dv = -\frac{\lambda s}{r_0^4} \varepsilon_0 \int f(\omega_p, \omega_p) dv, \quad (111)$$

$$\begin{aligned} E_C &= \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{\varrho_p(r) \varrho_p(r')}{|r - r'|} dv dv' = \frac{e^2}{18\pi^4 r_0^6} \iint \frac{\omega_p^3(r) \omega_p^3(r')}{|r - r'|} dv dv' = \\ &= \frac{1}{2} \frac{e}{3\pi^2 r_0^3} \int V(r) \omega_p^3(r) dv = \frac{1}{96\pi^2 e r_0^2} \varepsilon_0 \int V(r) \omega_p^3(r) dv, \end{aligned} \quad (112)$$

$$E_R = -\frac{e^2}{4\pi^2 r_0^4} \int \omega_p^4 dv = -\frac{1}{64\pi^2 r_0^3} \varepsilon_0 \int \omega_p^4 dv. \quad (113)$$

Hier bezeichnen μ_K , μ_J und λ die folgenden dimensionslosen Grössen

$$\mu_K = \frac{\kappa_K}{r_0^3 \varepsilon_0} = 3,814, \quad \mu_J = \frac{\kappa_J}{r_0^3 \varepsilon_0} = 0,1660, \quad \lambda = \frac{\gamma}{r_0 \varepsilon_0} = \frac{\gamma}{g^2}; \quad (114)$$

$V(r)$ ist das durch (93) definierte elektrostatische Potential der Protonen; zu integrieren ist überall auf alle Gebiete, in welchen ϱ_n und ϱ_p nicht verschwinden.

Statt γ wurde also λ eingeführt, λ ist ein zunächst unbestimmter dimensionsloser Parameter und zwar der einzige frei verfügbare Parameter, den wir mit Hilfe empirischer Daten bestimmen werden.

Die gesamte Energie E des Kerns ist die folgende

$$E = E_K + E_J + E_A^{np} + E_A^{nn} + E_A^{pp} + E_C + E_R. \quad (115)$$

Das Problem besteht darin, diejenigen Verteilungsfunktionen ϱ_n und ϱ_p bzw. ω_n und ω_p zu bestimmen, die die Energie des Kerns zum Minimum machen, wobei zu berücksichtigen ist, dass für ϱ_n und ϱ_p , bzw. für ω_n und ω_p die Nebenbedingungen

$$\int \varrho_n dv = \frac{1}{3\pi^2 r_0^3} \int \omega_n^3 dv = N, \quad (116)$$

$$\int \varrho_p dv = \frac{1}{3\pi^2 r_0^3} \int \omega_p^3 dv = Z \quad (117)$$

bestehen, durch die die Gesamtzahl der Neutronen bzw. Protonen im Kern festgelegt wird. Das Problem lässt sich also in der Form eines Variationsprinzips folgendermassen formulieren

$$\delta(E + b_n N + b_p Z) = 0, \quad (118)$$

wo b_n und b_p Lagrangesche Multiplikatoren bezeichnen und die Variation entweder hinsichtlich ϱ_n und ϱ_p oder hinsichtlich ω_n und ω_p zu erfolgen hat. Ferner sei bemerkt, dass für das elektrostatische Potential der Protonen die Poissonsche Gleichung

$$\Delta V = -4\pi e \varrho_p = -\frac{4e}{3\pi r_0^3} \omega_p^3 \quad (119)$$

bestehen muss.

Es würde keinerlei Schwierigkeiten bereiten das zur Bestimmung von ϱ_n und ϱ_p , bzw. von ω_n und ω_p dienende Differentialgleichungssystem mit den Randbedingungen herzuleiten. Die Lösung dieses Gleichungssystems würde aber zu sehr ausgedehnten und schwierigen numerischen Rechnungen führen, die man umgehen kann, wenn man das Variationsproblem mit Hilfe des Ritz-

schen Verfahrens direkt löst, wie wir dies im nächsten Paragraphen tun wollen. In diesem Fall genügt es neben den Bedingungen (116) und (117) die folgenden Randbedingungen zu berücksichtigen. Erstens muss aus Symmetriegründen der Anstieg der Richtungstangente von ϱ_n und ϱ_p , bzw. ω_n und ω_p im Kernmittelpunkt gleich 0 sein, d. h. es müssen die Bedingungsleichungen

$$\left(\frac{\partial \varrho_n}{\partial r}\right)_{r=0} = 0 \quad \text{und} \quad \left(\frac{\partial \varrho_p}{\partial r}\right)_{r=0} = 0, \quad (120)$$

bzw. die Gleichungen

$$\left(\frac{\partial \omega_n}{\partial r}\right)_{r=0} = 0 \quad \text{und} \quad \left(\frac{\partial \omega_p}{\partial r}\right)_{r=0} = 0 \quad (121)$$

bestehen, wo r die Entfernung vom Kernmittelpunkt bezeichnet. Zweitens muss ϱ_n und ϱ_p , bzw. ω_n und ω_p in unendlicher Entfernung vom Kern verschwinden.

§ 8. Der statistische Kern mit konstanter Nucleonendichte

Bevor wir die Lösung des Variationsproblems mit Hilfe des Ritzschen Verfahrens in Angriff nehmen, möchten wir vorerst noch die nullte Näherung besprechen, deren exakte Lösung eine durchweg konstante Dichteverteilung ist. Zu dieser nullten Näherung gelangt man, wenn man im Ausdruck der Gesamtenergie (115) nur die wichtigsten Energieanteile berücksichtigt; diese sind E_K und $E_A = E_A^{np} + E_A^{nn} + E_A^{pp}$. Wenn wir von den ganz leichten Kernen absehen, so sind alle übrigen Energieanteile im Verhältnis zu diesen beiden nur Korrektionsgrößen und können in nullter Näherung vernachlässigt werden. Konsequenterweise wird man dann auch die Korrektionsfaktoren k und s gleich 1 setzen. Ausserdem machen wir noch die vereinfachende Annahme, dass die Anzahl der Neutronen und Protonen gleich ist, d. h. dass $N = Z = A/2$ ist. Es wird dann

$$\varrho_n = \varrho_p = \frac{1}{2} \varrho \quad \text{und} \quad \omega_n = \omega_p = \omega, \quad (122)$$

wo ϱ die gesamte Nucleonendichte bezeichnet.

Für die Energie dieses vereinfachten Kernmodells erhält man

$$E = \frac{2\mu_K \varepsilon_0}{(3\pi^2)^{5/3} r_0^3} \int \omega^5 dv - \frac{6\lambda \varepsilon_0}{r_0^3} \int f(\omega, \omega) dv, \quad (123)$$

wobei ω der Nebenbedingung

$$\int \varrho dv = \frac{2}{3\pi^2 r_0^3} \int \omega^3 dv = A \quad (124)$$

zu genügen hat.

Das Variationsprinzip lautet nun⁴

$$\delta(E + bA) = 0, \quad (125)$$

wo b einen Lagrangeschen Multiplikator bezeichnet.

Aus (125) erhält man den Zusammenhang

$$\frac{10\mu_K\varepsilon_0}{(3\pi^2)^{5/3}}\omega^4 - 6\lambda\varepsilon_0\frac{\partial f}{\partial\omega} + b\frac{2}{3\pi^2}\omega^3 = 0. \quad (126)$$

Mit Rücksicht darauf, dass $\frac{\partial f}{\partial\omega}$ eine Funktion von ω allein ist und der Lagrangesche Multiplikator b eine Konstante ist, ergibt sich hieraus, dass ω , d. h. ϱ , konstant ist.

Dieses Resultat, das wir hier aus dem Variationsprinzip hergeleitet haben, hätten wir auch ohne jede Rechnung erhalten können. Aus dem Energieausdruck (123) der nullten Näherung ergibt sich nämlich, dass die Energiedichte, d. h. die Energie pro Volumeneinheit an jedem Punkt nur von der Teilchendichte an diesem Punkt selbst abhängt und von der Dichteverteilung der Umgebung des fraglichen Punktes völlig unabhängig ist. Es ist also im Kern kein Punkt energetisch ausgezeichnet, es wird sich daher — in Übereinstimmung mit unserem weiter oben erhaltenen Resultat — im ganzen Kern überall dieselbe Dichte einstellen und zwar diejenige, die zur tiefsten Energie führt.

Mit der konstanten Nucleonendichte folgt aus der Normierungsbedingung (124), dass sich die Dichte nur auf eine Kugel erstreckt und ausserhalb der Kugel überall Null ist. Wenn man das Volumen dieser Kugel mit Ω bezeichnet, so ergibt sich aus (124) die Beziehung

$$\varrho = \frac{2}{3\pi^2 r_0^3} \omega^3 = \frac{A}{\Omega}. \quad (127)$$

Mit Rücksicht darauf, dass ω konstant ist, erhält man mit Hilfe von (127) aus (123) für die Energie des Kerns

$$\begin{aligned} E &= \frac{2\mu_K\varepsilon_0}{(3\pi^2)^{5/3}r_0^3}\omega^5\Omega - \frac{6\lambda\varepsilon_0}{r_0^3}f(\omega, \omega)\Omega = \\ &= A\varepsilon_0 \left\{ \frac{\mu_K}{(3\pi^2)^{2/3}}\omega^2 - \frac{3\lambda}{8\pi}\frac{1}{\omega^3} [6\omega^4 - \omega^2 + \frac{1}{4}(1+12\omega^2)\ln(1+4\omega^2) - \right. \\ &\quad \left. - 8\omega^3 \operatorname{arctg} 2\omega) \right\}. \end{aligned} \quad (128)$$

Der einzige frei verfügbare Parameter in diesem Ausdruck ist λ . Wenn man

$$\lambda = 3,31 \quad (129)$$

setzt, so erhält man für das Energieminimum die Beziehung

$$E_0 = -0,50 A\varepsilon_0 = -8,5 A \text{ MeV}, \quad (130)$$

die abgesehen von den leichtesten Kernen, durch den empirischen Befund im Mittel gut bestätigt wird.

Das Energieminimum liegt beim folgenden Wert von ω

$$\omega = 2,39, \quad (131)$$

dem die Dichte

$$\varrho = 0,922 \frac{1}{r_0^3} \quad (132)$$

entspricht.

Für den Grenzradius R , bis zu welchem die Dichte ausläuft, erhält man mit $\omega = \omega_0$ aus (124)

$$R = \frac{(9\pi)^{1/3}}{2\omega_0} A^{1/3} r_0 = 0,637 A^{1/3} r_0. \quad (133)$$

Der Grenzradius ergibt sich also in dieser Näherung in Übereinstimmung mit dem empirischen Kernradius zu $A^{1/3}$ proportional und hat auch die richtige Grössenordnung. Darauf, inwiefern es zulässig ist diesen Grenzradius mit dem empirischen Kernradius unmittelbar zu vergleichen, kommen wir am Ende des § 9 zu sprechen.

§ 9. Berechnung der Dichteverteilung im Kern und der Energie des Kerns mit dem Ritzschen Verfahren

Wir wenden uns nun der Lösung des vollständigen Variationsproblems (64) mit Hilfe des Ritzschen Verfahrens zu. Das Ritzsche Verfahren besteht darin, dass man die unbekannten Funktionen — in unserem Fall die Dichteverteilungen ϱ_n und ϱ_p bzw. ω_n und ω_p — in einer den Randbedingungen genügenden Form mit zunächst unbestimmten Parametern ansetzt. Mit diesem Ansatz berechnet man dann die Energie als Funktion dieser Parameter und bestimmt die Parameter aus der Minimumsforderung der Energie, womit sich das ganze Verfahren auf ein gewöhnliches Minimumproblem reduziert. Zur exakten Bestimmung der gesuchten Funktionen hätte man unendlich viele, zunächst unbestimmte Parameter einzuführen, indem man z. B. die gesuchte Funktion nach zweckmässig gewählten Funktionen f_i mit zunächst unbestimmten Koeffizienten in eine Reihe entwickelt, also die gesuchte Funktion in der Form $\sum_i c_i f_i$ ansetzt. Die Funktionen f_i müssen dieselben Randbedingungen erfüllen, wie die gesuchte Funktion, können aber ansonsten beliebig gewählt werden. Da man im allgemeinen den Verlauf der gesuchten Funktion ungefähr kennt, geht man praktisch in der Weise vor, dass man die gesuchte Funktion in einer Form ansetzt, die der exakten möglichst nahe kommt und kann so meistens schon mit einer kleinen Anzahl von Parametern die unbekannte Funktion gut

annähern. Das Integral, dessen Minimum man aufsucht — im vorliegenden Fall die Energie — nähert sich relativ rasch dem exakten Wert und zwar bedeutend schneller als die approximierenden Funktionen sich der exakten Lösung anpassen. Die Energiewerte, die man mit den Näherungslösungen des Ritzschen Variationsverfahrens erhält, liegen naturgemäss höher als der exakte Energiewert.

Unser Problem ist kugelsymmetrisch, so dass wir nur eine unabhängige Variable, nämlich die Entfernung vom Kernmittelpunkt r haben. Es erweist sich als zweckmässig statt r die dimensionslose Variable

$$x = \frac{1}{3^{1/2}} a \frac{r}{r_0} \quad (134)$$

einzuführen, wo a einen Variationsparameter bezeichnet.¹⁹

Für ω_n und ω_p machen wir nun folgenden Ansatz

$$\omega_n = \omega_{n0} e^{-x^2} \sum_{i=0}^m \gamma_{ni} x^{2i}, \quad \omega_p = \omega_{p0} e^{-x^2} \sum_{i=0}^m \gamma_{pi} x^{2i}, \quad (135)$$

wo ω_{n0} und ω_{p0} Normierungsfaktoren sind und die Koeffizienten γ_{ni} , sowie γ_{pi} weitere Variationsparameter bezeichnen; die Koeffizienten γ_{n0} und γ_{p0} sind gleich 1 zu setzen. Die Normierungsfaktoren sind durch die Normierungsbedingungen (116) und (117) festgelegt. Die Variationsparameter a , γ_{ni} und γ_{pi} werden aus der Minimumsforderung der Energie bestimmt. Diese Ansätze erfüllen die Randbedingungen, denn einerseits genügen die Funktionen (135), wie sofort zu sehen ist, den Bedingungsgleichungen (121) und andererseits garantiert der Faktor e^{-x^2} in ω_n und ω_p das Verschwinden dieser Funktionen im Unendlichen.

Für $m = 1, 2, 3, \dots$, d. h. bei Berücksichtigung von 1, 2, 3, ... Gliedern der Summen in den Ausdrücken (135) erhält man einen schrittweise wachsenden Grad der Näherung. Wir beschränken uns hier auf den einfachsten Fall, bei dem alle Koeffizienten γ_{ni} und γ_{pi} , mit Ausnahme von γ_{n0} und γ_{p0} , gleich Null sind. Man hat dann

$$\omega_n = \omega_{n0} e^{-x^2}, \quad \omega_p = \omega_{p0} e^{-x^2}. \quad (136)$$

Dies bedeutet, dass wir die Dichteverteilung der Neutronen und Protonen als gleich ansetzen und einen Unterschied in den Dichtefunktionen nur insofern zulassen, dass wir diese gemäss der verschiedenen Anzahl der Neutronen und Protonen verschieden normieren.

Die Ansätze (136) enthalten nur einen einzigen Variationsparameter, nämlich den Parameter a , der gemäss (134) implicite in x enthalten ist und der naturgemäss auch in die Normierungsfaktoren ω_{n0} und ω_{p0} eingeht, für die sich aus (116) und (117) die folgenden Ausdrücke ergeben

$$\omega_{n0} = (9\pi)^{1/6} N^{1/3} a, \quad \omega_{p0} = (9\pi)^{1/6} Z^{1/3} a. \quad (137)$$

Der folgenden halber erweist es sich zur Abkürzung und zur Vereinfachung einiger Formeln als zweckmässig die folgenden Bezeichnungen einzuführen

$$c_n = 2\omega_{n0} = 2(9\pi)^{1/6} N^{1/3} a, \quad (138)$$

$$c_p = 2\omega_{p0} = 2(9\pi)^{1/6} Z^{1/3} a, \quad (139)$$

$$c = 2(9\pi)^{1/6} \left(\frac{N+Z}{2} \right)^{1/3} a = 2(9\pi)^{1/6} \left(\frac{A}{2} \right)^{1/3} a, \quad (140)$$

$$c_s = \frac{1}{2} (c_n + c_p), \quad (141)$$

$$c_d = \frac{1}{2} (c_n - c_p). \quad (142)$$

Es ist weiterhin zweckmässig ω_n und ω_p sowie ϱ_n und ϱ_p mit den Parametern c_n bzw. c_p weiterhin ϱ_n und ϱ_p auch noch als Funktionen von r darzustellen. Es ist

$$\omega_n = \frac{1}{2} c_n e^{-x^2}, \quad \omega_p = \frac{1}{2} c_p e^{-x^2} \quad (143)$$

und

$$\varrho_n = \frac{1}{3\pi^2 r_0^3} \omega_n^3 = \frac{1}{24\pi^2 r_0^3} c_n^3 e^{-3x^2} = \frac{N}{\pi^{3/2} r_0^3} a^3 e^{-a^2 r^2 / r_0^2}, \quad (144)$$

$$\varrho_p = \frac{1}{3\pi^2 r_0^3} \omega_p^3 = \frac{1}{24\pi^2 r_0^3} c_p^3 e^{-3x^2} = \frac{Z}{\pi^{3/2} r_0^3} a^3 e^{-a^2 r^2 / r_0^2}. \quad (145)$$

Nach all' diesen Vorbereitungen kommen wir nun auf unser ursprüngliches Ziel, auf die Berechnung der Energie als Funktion des Variationsparameters zu sprechen und zwar erweist es sich als zweckmässig statt a die zu a proportionale Grösse c als Variationsparameter einzuführen. Wir gehen von den Formeln (107)–(113) aus. Die Energieanteile E_K , E_J , E_C und E_R kann man nach der Durchführung elementarer Integrationen sehr einfach als Funktion von c angeben.

Für E_K ergibt sich

$$\begin{aligned} E_K &= \frac{4 \cdot 3^{3/2} \pi \kappa_K k}{(3\pi^2)^{5/2} r_0^5} \frac{1}{a^2} \int_0^\infty (\omega_n^5 + \omega_p^5) x^2 dx = \\ &= \frac{3}{20} \left(\frac{3}{5} \right)^{1/3} \frac{\mu_K}{(3\pi^2)^{2/3}} 2^{2/3} \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{5/3}} k A c^2 \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (146)$$

Der Ausdruck $2^{2/3}(N^{5/3} + Z^{5/3})/A^{5/3}$, der für $N=Z$ gleich 1 ist, lässt sich vereinfachen. Wenn man den Neutronenüberschuss mit n bezeichnet, d. h.

$$n = N - Z \quad (147)$$

setzt und den Ausdruck nach n/A in eine Reihe entwickelt, so erhält man

$$2^{2/3} \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{5/3}} = 1 + \frac{5}{9} \left(\frac{n}{A} \right)^2 + \frac{5}{243} \left(\frac{n}{A} \right)^4 + \dots \quad (148)$$

Wenn man diese Reihe nach dem zweiten Glied abbricht und den so gewonnenen Ausdruck in (146) einsetzt, so ergibt sich

$$\begin{aligned} E_K &= \frac{3}{20} \left(\frac{3}{5} \right)^{1/2} \frac{\mu_K}{(3\pi^2)^{2/3}} \left[1 + \frac{5}{9} \left(\frac{n}{A} \right)^2 \right] kAc^2\varepsilon_0 = \\ &= 0,04630 \left[1 + \frac{5}{9} \left(\frac{n}{A} \right)^2 \right] kAc^2\varepsilon_0. \end{aligned} \quad (149)$$

Für E_J erhält man

$$\begin{aligned} E_J &= \frac{12 \cdot 3^{1/2} \kappa_J}{\pi r_0^2} \frac{1}{a} \int_0^\infty \left[\omega_n \left(\frac{d\omega_n}{dx} \right)^2 + \omega_p \left(\frac{d\omega_p}{dx} \right)^2 \right] x^2 dx = \\ &= \frac{3\mu_J}{(18\pi)^{1/2}} A^{1/2} c^2 \varepsilon_0 = 0,1297 A^{1/2} c^2 \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (150)$$

Den Energieanteil E_C kann man nach einfacher Rechnung in folgender Form darstellen

$$E_C = \frac{2e}{3\pi r_0^2} \int_0^\infty V(x) \omega_p^2(x) x^2 dx = \frac{e^2}{(2\pi)^{1/2} r_0} Z^2 a = \frac{1}{(32)^{4/3} (72\pi^4)^{1/6}} \left(\frac{2Z}{A} \right)^2 A^{5/3} c^2 \varepsilon_0, \quad (151)$$

wo $V(x)$ das durch (93) definierte elektrostatische Potential der elektrischen Ladungsdichte $e\rho_p = \frac{e}{3\pi^2 r_0^2} \omega_p^2$ an der Stelle x ist. Wenn man den Faktor $2Z/A$ mit

Hilfe von (147) und des Zusammenhanges $A = N + Z$ mit A und n ausdrückt, so ergibt sich

$$\frac{2Z}{A} = 1 - \frac{n}{A}. \quad (152)$$

Nach Einsetzen in (151) folgt

$$\begin{aligned} E_C &= \frac{1}{(32)^{4/3} (72\pi^4)^{1/6}} \left[1 - 2 \frac{n}{A} + \left(\frac{n}{A} \right)^2 \right] A^{5/3} c^2 \varepsilon_0 = \\ &= 0,002250 \left[1 - 2 \frac{n}{A} + \left(\frac{n}{A} \right)^2 \right] A^{5/3} c^2 \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (153)$$

Für E_R erhält man

$$\begin{aligned} E_R &= - \frac{3^{3/2} e^2}{\pi^2 r_0} \frac{1}{a^3} \int_0^\infty \omega_p^4 x^3 dx = - \frac{27}{32\pi} \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/6} \frac{e^2}{r_0} Z^{4/3} a = \\ &= - \frac{27}{2048 \cdot 3^{1/2} \cdot \pi} \left(\frac{2Z}{A} \right)^{4/3} A c^2 \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (154)$$

Den Faktor $(2Z/A)^{4/3}$ kann man nach n/A in eine Reihe entwickeln. Mit Rücksicht auf den Zusammenhang (152) ergibt sich

$$\left(\frac{2Z}{A}\right)^{4/3} = 1 - \frac{4}{3} \frac{n}{A} + \frac{2}{9} \left(\frac{n}{A}\right)^2 + \dots \quad (155)$$

Wenn man diese Reihe nach dem dritten Glied abbricht und den so gewonnenen Ausdruck in (154) einsetzt, so folgt

$$\begin{aligned} E_R &= - \frac{27}{2048 \cdot 3^{1/2} \cdot \pi} \left[1 - \frac{4}{3} \frac{n}{A} + \frac{2}{9} \left(\frac{n}{A}\right)^2 \right] A c \varepsilon_0 = \\ &= - 0,002423 \left[1 - \frac{4}{3} \frac{n}{A} + \frac{2}{9} \left(\frac{n}{A}\right)^2 \right] A c \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (156)$$

Wir haben nun noch die Austauschenergien E_A^{np} , E_A^{nn} und E_A^{pp} als Funktionen von c zu berechnen, was etwas umständlicher ist. Aus (109), (110) und (111) ergibt sich mit Rücksicht auf (78) mit den Bezeichnungen (138)–(142)

$$\begin{aligned} E_A^{np} &= - 16 \cdot 3^{3/2} \pi \frac{\gamma}{r_0} \frac{1}{a^3} \int_0^\infty f(\omega_n, \omega_p) x^2 dx = \\ &= - \frac{24}{\pi} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} A \lambda \varepsilon_0 \frac{1}{c^3} \left\{ \frac{3\pi^{1/2}}{512} (c_n^3 c_p + c_n c_p^3) - \frac{1}{32} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} c_n c_p + \right. \\ &+ \frac{1}{4} [L(c_s) - L(c_d)] + \frac{3}{8} (c_n^2 + c_p^2) [K(c_s) - K(c_d)] - \\ &- \frac{3}{64} (c_n^4 - 2c_n^2 c_p^2 + c_p^4) [H(c_s) - H(c_d)] - \\ &\left. - \frac{1}{2} (c_n^3 + c_p^3) M(c_s) + \frac{1}{2} (c_n^3 - c_p^3) M(c_d) \right\}, \end{aligned} \quad (157)$$

$$\begin{aligned} E_A^{nn} &= - 4 \cdot 3^{3/2} \pi \frac{\gamma}{r_0} \frac{s}{a^3} \int_0^\infty f(\omega_n, \omega_n) x^2 dx = \\ &= - \frac{6}{\pi} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} s A \lambda \varepsilon_0 \frac{1}{c^3} \left[\frac{6\pi^{1/2}}{512} c_n^4 - \frac{1}{32} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} c_n^2 + \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} L(c_n) + \frac{3}{4} c_n^2 K(c_n) - c_n^2 M(c_n) \right], \end{aligned} \quad (158)$$

$$\begin{aligned} E_A^{pp} &= - 4 \cdot 3^{3/2} \pi \frac{\gamma}{r_0} \frac{s}{a^3} \int_0^\infty f(\omega_p, \omega_p) x^2 dx = \\ &= - \frac{6}{\pi} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} s A \lambda \varepsilon_0 \frac{1}{c^3} \left[\frac{6\pi^{1/2}}{512} c_p^4 - \frac{1}{32} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} c_p^2 + \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} L(c_p) + \frac{3}{4} c_p^2 K(c_p) - c_p^2 M(c_p) \right], \end{aligned} \quad (159)$$

wo L , K , H und M die folgenden Integrale

$$L(q) = \int_0^{\infty} x^2 \ln(1 + q^2 e^{-2x^2}) dx, \quad (160)$$

$$K(q) = \int_0^{\infty} x^2 e^{-2x^2} \ln(1 + q^2 e^{-2x^2}) dx, \quad (161)$$

$$H(q) = \int_0^{\infty} x^2 e^{-4x^2} \ln(1 + q^2 e^{-2x^2}) dx, \quad (162)$$

$$M(q) = \int_0^{\infty} x^2 e^{-2x^2} \operatorname{arctg}(1 + q e^{-x^2}) dx \quad (163)$$

bezeichnen und der Parameter q statt c_s , c_d , c_n und c_p steht.

Für $q > 1$ kann man diese Integrale geschlossen nicht auswerten, sondern man muss zu ihrer Auswertung numerische oder graphische Methoden anwenden.

Wir haben die Integrale $L(q)$, $K(q)$ und $M(q)$ in dem für unsere Berechnungen wichtigen Intervall $1,3 < q < 11$ für 18 verschiedene q -Werte und das Integral $H(q)$, das — wie wir sehen werden — in dem Ausdruck (157) nur eine untergeordnete Bedeutung besitzt, für 8 verschiedene q -Werte auf numerischen Wege sehr genau bestimmt. Die Resultate sind im mathematischen Anhang in der Tabelle 4 dargestellt. Für die Integrale $K(q)$, $H(q)$ und $M(q)$ kann man einfache Näherungsformeln herleiten, für die in dem für die Rechnungen wichtigsten q -Intervall der maximale Fehler 0,7% beträgt; das Integral $L(q)$ lässt sich durch einen brauchbaren Näherungsausdruck darstellen. Wir kommen hierauf ebenfalls im Anhang zu sprechen.

Für $q \leq 1$ kann man die Integrale durch die folgenden Reihen darstellen

$$L(q) = \frac{\pi^{1/2}}{2} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{1}{(2k)^{5/2}} q^{2k}, \quad (164)$$

$$K(q) = \frac{\pi^{1/2}}{4} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{1}{k(2k+2)^{3/2}} q^{2k}, \quad (165)$$

$$H(q) = \frac{\pi^{1/2}}{4} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{1}{k(2k+4)^{3/2}} q^{2k}, \quad (166)$$

$$M(q) = \frac{\pi^{1/2}}{4} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{1}{(2k-1)(2k+2)^{3/2}} q^{2k-1}. \quad (167)$$

Wir kehren nun zu den Ausdrücken (157)–(159) zurück. Unser Ziel ist diese Ausdrücke umzuformen und E_A^{np} , E_A^{nn} , sowie E_A^{pp} als Funktionen von c darzustellen. Dies kann schrittweise folgendermassen geschehen.

Wir befassen uns zuerst mit $E_A^{n,p}$ und wollen im Ausdruck von $E_A^{n,p}$ statt c_n und c_p zunächst die Parameter c_s und c_d einführen. Mit Rücksicht auf (138), (139), (141) und (142) bestehen die Beziehungen

$$c_n = c_s + c_d \quad \text{und} \quad c_p = c_s - c_d \quad (168)$$

mit denen man die in (157) vorkommenden nachstehenden Ausdrücke folgendermassen umformen kann

$$\left. \begin{aligned} c_n^3 c_p + c_n c_p^3 &= 2c_s^4 - 2c_d^4, \\ c_n c_p &= c_s^2 - c_d^2, \\ c_n^2 + c_p^2 &= 2c_s^2 + 2c_d^2, \\ c_n^4 + c_p^4 - 2c_n^2 c_p^2 &= 16c_s^2 c_d^2, \\ c_n^3 + c_p^3 &= 2c_s^3 + 6c_s c_d^2, \\ c_n^3 - c_p^3 &= 6c_s^2 c_d + 2c_d^3. \end{aligned} \right\} \quad (169)$$

Wenn man zur Abkürzung die Bezeichnungen

$$F(q) = \frac{36}{\pi} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{q^3} \left[\frac{6\pi^{1/2}}{512} q^4 - \frac{1}{32} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} q^2 + \frac{1}{4} L(q) + \frac{3}{4} q^3 K(q) - q^3 M(q) \right], \quad (170)$$

$$S(q) = \frac{72}{\pi} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{q^3} \left[\frac{1}{4} q^4 H(q) + q^3 M(q) - \frac{1}{4} q^2 K(q) \right] \quad (171)$$

einführt, so kann man $E_A^{n,p}$ mit den Zusammenhängen (169) wie folgt schreiben

$$E_A^{n,p} = - \left[\frac{2}{3} \left(\frac{c_s}{c} \right)^3 F(c_s) - \frac{2}{3} \left(\frac{c_d}{c} \right)^3 F(c_d) - \frac{c_s}{c} \left(\frac{c_d}{c} \right)^2 S(c_s) + \frac{c_d}{c} \left(\frac{c_s}{c} \right)^2 S(c_d) \right] A \lambda \varepsilon_0. \quad (172)$$

Eine wesentliche Vereinfachung dieses Ausdruckes kann mit Rücksicht auf die folgenden beiden Umstände erfolgen. Erstens ist von den in diesen Ausdruck eingehenden Parametern c , c_s und c_d der Parameter c_d von kleinerer Grössenordnung als c_s und c , die von gleicher Grössenordnung sind;²⁰ und zwar ist durchweg $c_d/c < 1/10$; für $N = Z$ verschwindet c_d . Zweitens ist in dem für die weiteren Berechnungen wichtigen Bereich ($c \approx 6,5$) der Parameter c_d stets kleiner als 1. Mit Rücksicht auf all' das lässt sich $E_A^{n,p}$ nach Potenzen von c_d/c in eine rasch konvergierende Reihe entwickeln, die man, wie sich zeigt, ohne einen merklichen Fehler zu begehen schon nach dem Glied mit $(c_d/c)^2$ abbrechen kann.

Wie man sich leicht überzeugt, ist das wesentliche Glied in (172) das erste Glied, die drei nachstehenden Glieder sind Korrektionsglieder.²¹ Wir wollen nun zunächst diese Korrektionsglieder nach c_d/c entwickeln.

Beim zweiten Glied in (172) geht die Entwicklung von $F(c_d)$ auf die Entwicklung von $L(c_d)$, $K(c_d)$ und $M(c_d)$ zurück, die an Hand der Formeln (164), (165) und (167) vorgenommen werden kann. Es ergibt sich, dass in $F(c_d)$ das erste nicht verschwindende Glied von der Grössenordnung c_d^3 ist. Mit Rücksicht hierauf wird das zweite Glied in (172) von der Grössenordnung $c_d^3(c_d/c)^3$ und ist neben dem ersten Glied gänzlich unbedeutend, kann also gestrichen werden.

Das dritte Glied in (172) muss nicht eigenst nach c_d/c entwickelt werden, da es c_d nur in dem Faktor $(c_d/c)^2$ enthält. Man kann aber hier — da es sich nur um ein Korrektionsglied handelt — noch die Vereinfachung durchführen, dass man in diesem Glied statt c_s überall c setzt. Die Differenz von c_s und c ist nämlich im wesentlichen zu c_d^2 proportional,²² der Unterschied zwischen c_s und c würde sich also in diesem Korrektionsglied nur in einer zu $(c_d/c)^4$ proportionalen Korrektion äussern, die vernachlässigt werden kann. Wir haben also

$$\frac{c_s}{c} \left(\frac{c_d}{c} \right)^3 S(c_s) = \left(\frac{c_d}{c} \right)^3 S(c). \quad (173)$$

Im vierten Glied in (172) kann man die Integrale $K(c_d)$, $H(c_d)$ und $M(c_d)$ wieder mit Hilfe der Formeln (165)–(167) nach c_d entwickeln. Mit Rücksicht darauf, dass man auch hier, gerade so wie im dritten Glied in (172) $c_s = c$ setzen kann, ergibt sich nach einfacher Rechnung

$$\frac{c_d}{c} \left(\frac{c_s}{c} \right)^2 S(c_d) = \tau c \left(\frac{c_d}{c} \right)^2 \quad (174)$$

mit

$$\tau = \frac{72}{\pi} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/2} \frac{3\pi^{1/2}}{128} = \frac{27 \cdot 3^{1/2}}{16\pi} = 0,93037. \quad (175)$$

Das nächste nicht verschwindende Glied in der Entwicklung des auf der linken Seite von (174) stehenden Ausdruckes wäre das Glied mit $(c_d/c)^4$, das aber neben dem auf der rechten Seite von (174) stehenden Glied unbedeutend ist.

Mit Berücksichtigung all' dieser Resultate ergibt sich also aus (172)

$$E_A^{np} = -\frac{2}{3} \left(\frac{c_s}{c} \right)^3 F(c_s) A\lambda \varepsilon_0 + [S(c) - \tau c] \left(\frac{c_d}{c} \right)^2 A\lambda \varepsilon_0. \quad (176)$$

Bevor wir in diesem Ausdruck $F(c_s)$ von der Variable c_s auf die Variable c transformieren, ist es zweckmässig auch die Energieanteile E_A^{nn} und E_A^{pp} in Betracht zu ziehen und diese Transformation dann im Ausdruck der gesamten Austauschenergie durchzuführen.

Die durch (158) und (159) definierten Energieausdrücke E_A^{nn} und E_A^{pp} lassen sich mit der Bezeichnung (170) in folgender Form schreiben

$$E_A^{nn} = -\frac{s}{6} \left(\frac{c_n}{c}\right)^3 F(c_n) A \lambda \varepsilon_0, \quad E_A^{pp} = -\frac{s}{6} \left(\frac{c_p}{c}\right)^3 F(c_p) A \lambda \varepsilon_0. \quad (177)$$

Mit Hilfe der Beziehungen (168) kann man diese Ausdrücke von den Variablen c_n und c_p auf die Variable c_s transformieren und zugleich E_A^{nn} und E_A^{pp} nach c_d/c in eine Reihe entwickeln, die wir wieder nach dem Glied mit $(c_d/c)^2$ abbrechen. Nach einfacher Rechnung folgt

$$E_A^{nn} + E_A^{pp} = -\frac{s}{3} \left(\frac{c_s}{c}\right)^3 F(c_s) A \lambda \varepsilon_0 - [F(c) + cF'(c) + \frac{1}{6} c^2 F''(c)] \left(\frac{c_d}{c}\right)^2 A \lambda \varepsilon_0; \quad (178)$$

hier ist wieder das erste Glied das wesentliche und das zweite das Korrektionsglied, in dem geradeso wie in (173) und (174) wieder $c_s = c$ gesetzt wurde; F' und F'' bezeichnet die erste bzw. zweite Ableitung von $F(c)$ nach c . Im Korrektionsglied wurde der Korrektionsfaktor s mit 1 gleichgesetzt.

Mit (176) und (178) können wir nun die gesamte Austauschenergie folgendermassen darstellen

$$E_A = E_A^{np} + E_A^{nn} + E_A^{pp} = -\left(\frac{2}{3} + \frac{s}{3}\right) \left(\frac{c_s}{c}\right)^3 F(c_s) A \lambda \varepsilon_0 + \\ + \left\{ S(c) - \tau c - [F(c) + cF'(c) + \frac{1}{6} c^2 F''(c)] \right\} \left(\frac{c_d}{c}\right)^2 A \lambda \varepsilon_0. \quad (179)$$

Wir müssen also das erste Glied noch von der Variable c_s auf die Variable c transformieren.

Bevor wir diesen letzten Schritt tun und mit Hilfe der Identität $c_s = c + (c_s - c)$ das erste Glied auf der rechten Seite in (179) nach der kleinen Grösse $(c_s - c)/c$ in eine Reihe entwickeln und zugleich statt c_s die Variable c einführen, ist es zweckmässig c_d/c und $(c_s - c)/c$ mit dem Neutronenüberschuss $n = N - Z$ und der Massenzahl $A = N + Z$ darzustellen, was in einer sehr einfachen Form geschehen kann.

Hierzu drücken wir N und Z durch n und A aus; man hat

$$N = \frac{1}{2} (A + n), \quad Z = \frac{1}{2} (A - n). \quad (180)$$

Wenn man diese Ausdrücke in (138) bzw. (139) einsetzt, $N^{1/3}$ bzw. $Z^{1/3}$ nach n/A in eine Reihe entwickelt und die Reihe nach dem in n/A linearen Glied abbricht, so folgt für c_d/c

$$\frac{c_d}{c} = \frac{c_n - c_p}{2c} = \frac{1}{3} \frac{n}{A}. \quad (181)$$

Das nächste nichtverschwindende Glied der Entwicklung wäre von der Grössenordnung $(n/A)^3$ und kann vernachlässigt werden.

Zur Berechnung von $(c_s - c)/c$ entwickeln wir ganz ähnlich wie zuvor c_s nach n/A in eine Reihe. Wenn man die Reihe nach dem Glied mit $(n/A)^2$ abbricht, so hat man

$$c_s = \frac{1}{2} (c_n + c_p) = c - c \frac{1}{9} \left(\frac{n}{A} \right)^2, \quad (182)$$

$$\frac{c_s - c}{c} = -\frac{1}{9} \left(\frac{n}{A} \right)^2 = -\left(\frac{c_d}{c} \right)^2. \quad (183)$$

Das nächste nichtverschwindende Glied der Entwicklung ist zu $(n/A)^4$ proportional und kann vernachlässigt werden. Während also c_d/c zu n/A proportional ist, erweist sich $(c_s - c)/c$ zu $(n/A)^2$ proportional.

Mit Rücksicht hierauf und auf unsere Festsetzung, dass wir im Energieausdruck Glieder von kleinerer Grössenordnung als $(c_d/c)^2 \sim \frac{1}{10} (n/A)^2$ vernachlässigen, können wir die Entwicklung des Energieausdruckes (179) nach $c_s - c$ nach dem in $c_s - c$ linearen Glied abbrechen. Es lässt sich also der von c_s abhängige Anteil des ersten Gliedes in (179) folgendermassen darstellen

$$\left(\frac{c_s}{c} \right)^3 F(c_s) = F(c) - \frac{1}{3} F(c) \left(\frac{n}{A} \right)^2 - \frac{1}{9} c F'(c) \left(\frac{n}{A} \right)^2. \quad (184)$$

In diesem Ausdruck ist das erste Glied das wesentliche, die Glieder, die $(n/A)^2$ enthalten, sind Korrektionsglieder.

Nach Einsetzen dieses Ausdruckes in (179) kann man im Korrektionsglied wieder den Korrektionsfaktor s mit 1 gleichsetzen. Wenn man weiterhin in dem so gewonnenen Ausdruck c_d/c mit Hilfe von (181) durch n/A ausdrückt, so erhält man schliesslich für E_A als Funktion von c den Ausdruck

$$E_A = - \left(\frac{2}{3} + \frac{s}{3} \right) F(c) A \lambda \varepsilon_0 + \frac{1}{9} \left[S(c) - \tau c + 2 F(c) - \frac{1}{6} c^2 F''(c) \right] \left(\frac{n}{A} \right)^2 A \lambda \varepsilon_0. \quad (185)$$

Die für diese Energie ausschlaggebende Funktion $F(c)$ ist für 18 verschiedene c -Werte bis zu 4 Stellen genau in der Tabelle 4 im Anhang angegeben.

Durch einige orientierende Berechnungen lässt sich leicht feststellen, dass die aus der Minimumsforderung der Energie zu bestimmenden c -Werte von den ganz leichten bis zu den schwersten Kernen alle in das Intervall

$$5,4 < c < 7,5 \quad (186)$$

fallen; wir können uns also im folgenden auf die c -Werte dieses Intervalles beschränken. Zur Vereinfachung der Rechnungen kann man nun so vorgehen,

dass man die Funktionen $F(c)$ und $S(c)$, die die Integrale (160)—(163) enthalten, in diesem Intervall durch möglichst einfache Funktionen approximiert. Die Approximation von $F(c)$ hat man mit besonderer Sorgfalt durchzuführen, denn durch $F(c)$ wird der wesentliche Anteil von E_A dargestellt. Es zeigt sich nun, dass gerade diese Approximation sehr einfach durchzuführen ist; da $F(c)$ im Intervall (186) angenähert linear verläuft. Man vgl. hierzu Fig. 2, in der

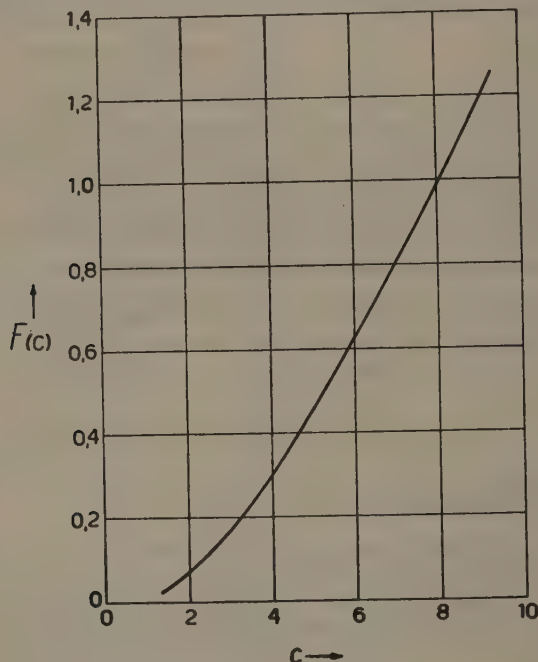


Fig. 2. Verlauf der Funktion $F(c)$.

$F(c)$ graphisch dargestellt ist. Man findet, dass man — ohne einen merklichen Fehler in den Resultaten zu begehen — die beiden Funktionen in folgender Form darstellen kann

$$F(c) = a_1 c^2 + a_2 c + a_3, \quad (18)$$

$$S(c) = b_1 c^3 + b_2 c. \quad (19)$$

Für die Koeffizienten ergibt sich mit der Methode der kleinsten Quadrate

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= 0,006238, & b_1 &= 0,05375, \\ a_2 &= 0,09723, & b_2 &= 0,93456. \\ a_3 &= -0,1858, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Mit dieser Wahl der Koeffizienten approximieren im Intervall (186) beide Polynome die exakten Funktionen ganz ausgezeichnet;²³ der maximale Fehler ist in beiden Fällen kleiner als 0,2%. Es sei noch erwähnt, dass im Korrektionsglied von E_A die zweite Ableitung von $F(c)$ eingeht, und für diese die Approximation naturgemäss schlechter ist als für $F(c)$. Dies ist jedoch — da es sich nur um ein Korrektionsglied handelt — nicht von Bedeutung.

Mit den Funktionen (187) und (188) und nach Einsetzen des Wertes $= 1 - \frac{2}{A}$ für den Korrektionsfaktor ergibt sich nun E_A im Intervall (186) in folgender endgültiger Form

$$\begin{aligned} E_A = & - \left\{ \left(1 - \frac{2}{3A} \right) (a_1 c^2 + a_2 c + a_3) - \frac{1}{9} \left[\left(\frac{5}{3} a_1 + b_1 \right) c^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + (2a_2 + b_2 - \tau) c + 2a_3 \right] \left(\frac{n}{A} \right)^2 \right\} A \lambda \varepsilon_0 = \\ = & - \left[\left(1 - \frac{2}{3A} \right) (0,006238 c^2 + 0,09723 c - 0,1858) - \right. \\ & \left. - (0,007127 c^2 + 0,02208 c - 0,04129 \left(\frac{n}{A} \right)^2) \right] A \lambda \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (190)$$

Durch Summation der Energieausdrücke (149), (150), (153), (156) und (190) kann man die Gesamtenergie E des Kerns als Funktion von c in folgender Form darstellen

$$E = E_K + E_J + E_A + E_C + E_R = (P_1 c^2 - P_2 c + P_3) A \varepsilon_0, \quad (191)$$

wo P_1 , P_2 und P_3 nur von der Massenzahl A und vom Verhältnis n/A abhängige Konstanten von der folgenden Form sind

$$P_1 = \alpha_0 + \alpha_2 \left(\frac{n}{A} \right)^2, \quad P_2 = \beta_0 + \beta_1 \frac{n}{A} + \beta_2 \left(\frac{n}{A} \right)^2, \quad P_3 = \gamma_0 + \gamma_2 \left(\frac{n}{A} \right)^2. \quad (192)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_0 &= 0,04630 - 0,0062380 \lambda + 0,1297 \frac{1}{A^{2/3}} - (0,1852 - 0,004159 \lambda) \frac{1}{A}, \\ \alpha_2 &= 0,02572 + 0,007127 \lambda - 0,1029 \frac{1}{A}, \\ \beta_0 &= 0,09723 \lambda + 0,002423 - 0,002250 A^{2/3} - 0,06482 \lambda \frac{1}{A}, \\ \beta_1 &= -0,003231 + 0,004500 A^{2/3}, \\ \beta_2 &= -0,02208 \lambda + 0,00054 - 0,002250 A^{2/3}, \\ \gamma_0 &= 0,1858 \lambda - 0,1239 \lambda \frac{1}{A}, \\ \gamma_2 &= 0,04129 \lambda, \end{aligned} \right\} \quad (193)$$

wobei bemerkt sei, dass wir für den Korrektionsfaktor k den Wert $k = 1 - \frac{4}{A}$ einsetzen. Die Grössen $\alpha_0, \alpha_2, \beta_0, \beta_1, \beta_2, \gamma_0$ und γ_2 sind also Funktionen von A allein. In den Ausdrücken P_1, P_2 und P_3 sind die Glieder, die n/A oder $(n/A)^2$ enthalten, wieder Korrektionsgrössen, die mit verschwindendem Neutronenüberschuss verschwinden.

Die Bestimmung des Variationsparameters c geschieht aus der Minimumforderung von E also aus der Gleichung

$$\frac{dE}{dc} = 2P_1c - P_2 = 0, \quad (194)$$

aus der

$$c_0 = \frac{P_2}{2P_1} \quad (195)$$

folgt.

Mit diesem Wert von c erhält man für das Minimum von E den Ausdruck

$$E_0 = - \left(\frac{P_2^2}{4P_1} - P_3 \right) A \varepsilon_0, \quad (196)$$

der geradeso wie c_0 noch eine Funktion von A und n/A ist.

§ 10. Resultate für die Kernenergie und für die Dichteverteilung im Kern

Die Energie des Kerns wird durch E_0 dargestellt. Nach Einsetzen der Ausdrücke (192) und (193) in (196) erhält man E_0 als Funktion der Massenzahl $A = N + Z$ und des Neutronenüberschusses $n = N - Z$. Für ein vorgegebenes A ist also die Kernenergie immer noch eine Funktion von n , die die Energie der Isobaren mit der Massenzahl A darstellt. Das Minimum dieser Funktion entspricht dem stabilsten Isobar mit der Massenzahl A .

Die Reihe dieser stabilsten Kerne, d. h. diejenigen n - oder Z -Werte, bei denen für die vorgegebenen A -Werte das Minimum der Energie liegt, erhält man aus der Forderung

$$\left(\frac{\partial E_0}{\partial n} \right)_A = 0. \quad (197)$$

Um hieraus Z als Funktion von A zu berechnen, entwickeln wir E_0 nach n/A in eine Reihe, die wir nach dem Glied mit $(n/A)^2$ abbrechen. Es ergibt sich

$$E_0 = - \left[\frac{1}{4} \frac{\beta_0^2}{\alpha_0} - \gamma_0 + \frac{1}{2} \frac{\beta_0 \beta_1}{\alpha_0} \frac{n}{A} + \frac{1}{4} \frac{1}{\alpha_0} (\beta_1^2 + 2\beta_0 \beta_2 - \frac{\alpha_2}{\alpha_0} \beta_0^2 - 4\alpha_0 \gamma_2) \left(\frac{n}{A} \right)^2 \right] A \varepsilon_0. \quad (198)$$

Wenn man diesen Ausdruck in (197) einsetzt, die Differentiation nach n ausführt und nachher statt n definitionsgemäss $N-Z$ setzt, so erhält man für die Ordnungszahl der stabilsten Kerne den Ausdruck

$$Z_{\text{eff}} = \left(1 + \frac{\alpha_0 \beta_0 \beta_1}{\alpha_0 \beta_1^2 + 2\alpha_0 \beta_0 \beta_2 - \alpha_2 \beta_0^2 - 4\alpha_0^2 \gamma_2} \right) \frac{A}{2}. \quad (199)$$

Da die so berechnete Ordnungszahl Z_{eff} nicht ganzzahlig ist, wird man als Ordnungszahl Z des stabilsten Kerns mit der Messenzahl A die zu dieser Zahl am nächsten liegende ganze Zahl und als Neutronenüberschuss den mit diesem ganzzahligen Z aus der Beziehung $n = A - 2Z$ berechneten n -Wert betrachten.

Mit Hilfe dieses Zusammenhanges können wir für jeden A -Wert für den stabilsten Kern die Ordnungszahl Z oder den Neutronenüberschuss $n = A - 2Z$ berechnen. Die Energie E_{00} der stabilsten Kerne erhält man, wenn man für jedes vorgegebene A die Energie mit den so bestimmten auf ganze Zahlen abgerundeten n -Werten aus (196) mit Hilfe von (192) und (193) berechnet.

Allerdings kann man diese Berechnungen nur dann durchführen, wenn man die noch immer unbestimmte Konstante λ festlegt. Wir haben diese so gewählt, dass die berechneten Energien der stabilsten Kerne von den ganz leichten Kernen bis zu den schwersten die möglichst kleinste Abweichung von den entsprechenden empirischen Werten zeigten. Wir wählten für λ den Wert

$$\lambda = 4,140 \quad (200)$$

mit dem unsere Forderung in sehr befriedigender Weise erfüllt wird. Dass der hier erhaltene λ -Wert grösser ist, als der für das Kernmodell mit konstanter Dichte im § 8 erhaltene, ist eine Folge dessen, dass dort die Abstossungsenergien E_J und E_C vernachlässigt wurden, während diese bei der hier durchgeführten genaueren Berechnung in Betracht gezogen sind, demzufolge man diese durch eine grössere Anziehungsenergie, d.h. einen grösseren λ -Wert kompensieren muss.

Die auf ein Teilchen entfallenden berechneten mittleren Energien E_{00}/A der Kerne, die für ein vorgegebenes A die tiefste Energie besitzen (stabilste Isobare), sowie die entsprechenden empirischen Werte,²⁴ weiterhin die c_0 -Werte für diese Kerne, die wir mit c_{00} bezeichnen, sind in der Tabelle 1 zusammengestellt; E_{00}/A als Funktion von A ist ausserdem in Fig. 3 zusammen mit den empirischen Werten auch graphisch dargestellt. Als empirische mittlere Kernenergie für ein vorgegebenes A haben wir die auf ein Teilchen entfallende mittlere Energie des stabilen Kerns mit tiefster Energie angegeben; für solch' einen A -Wert, für den keine stabilen Kerne existieren, ist die auf ein Teilchen entfallende mittlere Energie des instabilen Kerns mit tiefster Energie angeführt. Wie man aus einem Vergleich sieht, stimmen die berechneten Energien mit den empirischen sehr gut überein. Für die mittelschweren und schweren Kerne

ist die maximale Abweichung der berechneten Energie von der empirischen durchweg kleiner als 7% ; für die leichten Kerne kann die statistische Theorie naturgemäss nur einen Mittelwert der stark schwankenden empirischen Resultate liefern, was von der Theorie auch tatsächlich vorzüglich geleistet wird. Durch die weiter oben erwähnte Abrundung der aus (199) berechneten Z_{el} -Werte machen sich im Energieverlauf bei den ganz leichten Kernen — wo die Energiedifferenz zwischen den einzelnen Gliedern einer Isobarenreihe relativ

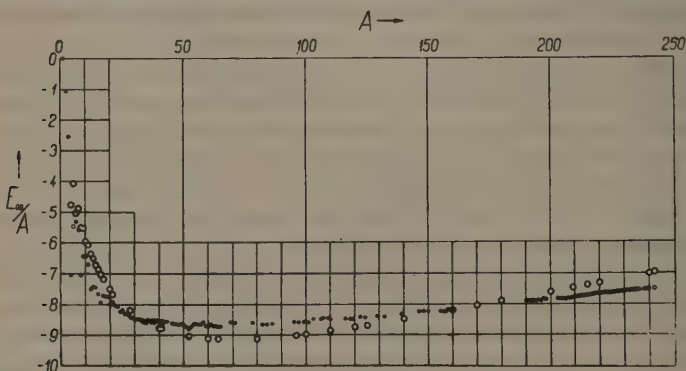


Fig. 3. Die auf ein Teilchen entfallende mittlere Energie E_{00}/A als Funktion von A , für die Kerne die für ein vorgegebenes A die tiefste Energie besitzen.

- berechnete Werte,
- empirische Werte für stabile Kerne,
- ◐ empirische Werte für instabile Kerne.

gross ist — Schwankungen bemerkbar, und zwar liegen die auf ein Teilchen entfallenden mittleren Energien E_{00}/A der stabilsten Isobare mit nacheinander folgenden A -Werten auf keiner glatten Kurve, sondern sie liegen für gerade Massenzahlen etwas tiefer und für ungerade etwas höher als es dem glatten Verlauf entsprechen würde.

Die Ursache dessen, dass die Theorie auch für leichte Kerne zu so guten Resultaten führt, ist im wesentlichen darin zu suchen, dass wir einerseits den Ausdruck der kinetischen Energie korrigierten, wodurch dieser für $A \leq 10$ in den exakten wellenmechanischen Ausdruck übergeht und andererseits auch an der Austauschenergie gleicher Teilchen eine Korrektur anbrachten, die den Selbstaustausch der Teilchen eliminiert.

Bei der Beurteilung der Resultate ist hervorzuheben, dass wir diese mit Hilfe nur eines einzigen empirischen Parameters, des Parameters λ , erzielten.

Mit den Ausdrücken (193) hat die Energieformel (196) nur für $A \geq 10$ Gültigkeit. Man kann nun, mehr zur Orientierung die Berechnungen auch auf

TABELLE 1

Vergleich der berechneten Kernladungszahlen und Kernenergien mit den empirischen Werten für die Kerne, die für ein vorgegebenes A die tiefste Energie besitzen. Sofern für ein vorgegebenes A der Kern mit der empirisch tiefsten Energie mangels experimenteller Daten nicht festzustellen ist, sind die Kernladungszahlen aller stabilen Isobare angeführt; die Kernladungszahlen der instabilen Kerne sind eingeklammert. Die Energien sind in MeV-Einheiten angegeben.

A	Theoretisch				Empirisch	
	c_{00}	Z_{eff}	Z	$-E_{00}/A$	Z	$-E_{00}/A$
4	5,546	1,97	2	4,769	2	7,05
5	5,254	2,45	2	4,098	(2)	5,48
6	5,556	2,94	3	5,039	3	5,32
7	5,470	3,42	3	4,891	3	5,59
8	5,680	3,91	4	5,516	(4)	7,039
9	5,660 _s	4,39	4	5,542	4	6,442
10	5,814	4,87	5	5,972	5	6,443
11	5,822	5,35	5	6,072	5	6,709
12	5,938	5,83	6	6,372	6	7,515
13	5,959	6,30	6	6,506	6	7,435
14	6,050	6,78	7	6,718	7	7,477
15	6,077	7,26	7	6,871	7	7,671
16	6,149	7,73	8	7,015	8	7,948
17	6,180	8,21	8	7,177	8	7,724
20	6,316	9,62	10	7,498	10	7,999
21	6,350	10,09	10	7,663	10	7,933
28	6,540	13,37	13	8,203	14	8,426
40	6,803	18,89	19	8,788	18	8,556
41	6,796	19,35	19	8,804	19	8,551
52	6,928	24,33	24	9,040	24	8,830
60	7,010	27,90	28	9,126	28	8,752
64	7,042	29,67	30	9,141	28	8,760
80	7,113	36,67	37	9,130	34; 36	—
96	7,150	43,52	44	9,019	40; 42; 44	—
100	7,134	45,21	45	8,984	42; 44	—
110	7,132	49,40	49	8,873	46; 48	—
120	7,157	53,53	54	8,759	50; 52	—
125	7,153	55,58	56	8,697	52	—
140	7,135	61,64	62	8,494	58	—
160	7,105	69,52	70	8,209	64; 66	8,202
170	7,059	73,39	73	8,051	68; 70	—
180	7,042	77,19	77	7,907	72; 74	—
200	7,005	84,63	85	7,610	80	—
209	6,972	87,90	88	7,473	83	7,799
215	6,951	90,05	90	7,384	(85)	7,719
220	6,941	91,83	92	7,308	(86)	7,669
240	6,879	98,78	99	7,014	(96)	7,496
242	6,854	99,46	99	6,973	(96)	7,488

die Kerne $A < 4$ ausdehnen, wobei man zu berücksichtigen hat, dass für $A < 4$ der durch (103) und (104) definierte Korrektionsfaktor k gleich Null zu setzen ist. Bemerkenswerterweise führen diese Berechnungen zu keinesfalls unsinnigen Resultaten, was den weiter oben erwähnten beiden Korrekturen zuzu schreiben ist.

In der Tabelle 1 haben wir auch die mit Hilfe von (199) für die stabilsten Kerne berechneten Z_{eff} -Werte angeführt, die — wie schon erwähnt wurde — im allgemeinen keine ganzen Zahlen sind. Die theoretischen Z -Werte, d. h. die zu Z_{eff} am nächsten stehenden ganzen Zahlen sind in der vierten Spalte der Tabelle zu finden. Zum Vergleich haben wir in der Tabelle auch die empirischen Ordnungszahlen²⁵ der stabilsten Isobare angegeben; sofern das stabilste Isobar mangels experimenteller Daten nicht festzustellen ist, sind die Ordnungszahlen aller stabilen Isobare angeführt. Ein Vergleich der theoretischen Z -Werte mit den empirischen führt auch hier zu einem sehr befriedigenden Resultat; die maximale Abweichung der berechneten Ordnungszahlen von den empirischen beträgt weniger als 8%.

Ausser den hier angegebenen Resultaten ist noch die Grösse der einzelnen Energieanteile von Interesse, aus denen sich die Energie der Kerne zusammensetzt. Diese sind ebenfalls für die stabilsten Isobare in der Tabelle 2 zusammengestellt. Wie aus diesen Daten zu sehen ist, sind mit Ausnahme der leichtesten Kerne die wesentlichsten Energieanteile E_A und E_K , die Energieanteile E_J , E_C und besonders E_R fallen im Verhältnis zu diesen bedeutend geringer ins Gewicht. Eine Ausnahme bilden nur die ganz leichten Kerne, für die neben E_A nicht E_K , sondern E_J das wesentlichste Glied darstellt. Es sei noch bemerkt, dass von den Energieanteilen E_J und E_C , der erstere für leichte und der letztere für schwere

TABELLE 2

Die Gesamtenergie der Kerne und die Anteile, aus denen sich diese zusammensetzt für verschiedene Kerne. Alle Energien in MeV-Einheiten.

A	Z	$-E_A$	E_K	E_J	E_C	$-E_R$	$-E_{00}$
4	2	128,012	0	107,726	2,140	0,914	19,060
5	2	147,935	22,227	104,155	1,882	0,804	20,475
6	3	205,457	48,629	123,770	4,213	1,374	30,219
7	3	234,623	71,490	126,266	3,940	1,285	34,212
8	4	293,192	101,638	142,359	6,957	1,873	44,111
9	4	328,799	127,038	147,039	6,666	1,794	49,850
10	5	388,030	159,736	160,673	10,328	2,396	59,689
12	6	488,073	222,170	178,107	14,295	2,937	76,438
16	8	699,63	357,33	210,20	23,91	4,05	112,24
20	10	922,27	502,90	239,00	35,63	5,21	149,95
40	19	2113,87	1313,80	349,14	109,93	10,47	351,47
60	28	3343,73	2172,66	424,43	214,92	15,81	547,53
80	37	4573,39	3037,24	480,87	345,95	21,14	730,47
100	45	5739,13	3868,94	521,12	476,45	25,78	898,40
120	54	6930,5	4705,1	557,4	647,7	30,8	1051,1
140	62	8038,4	5492,4	583,2	808,6	35,0	1189,2
160	70	9116,0	6255,7	604,6	981,7	39,2	1313,2
180	77	10083,0	6953,0	617,7	1132,0	42,4	1422,7
200	85	11102,7	7668,8	633,1	1324,9	46,5	1522,4
220	92	12006,3	8316,8	641,6	1489,8	49,6	1607,7
240	99	12883,4	8943,8	648,7	1660,8	52,6	1682,7

Kerne eine relativ grössere Bedeutung besitzt, wie dies auch aus den Formeln (150) und (151) unmittelbar zu sehen ist, da hiernach wegen des praktisch konstanten Wertes von c die Energie E_J zu $A^{1/3}$ und die Energie E_C zu $A^{6/3}$ proportional ist.

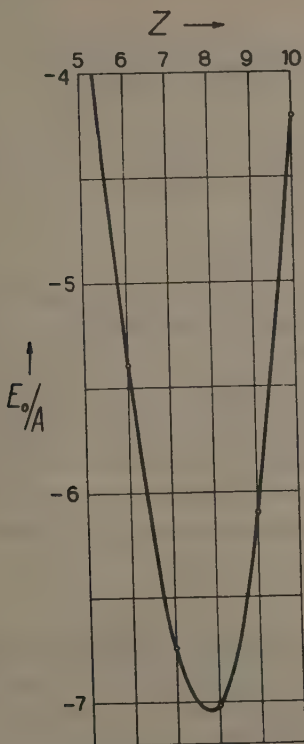


Fig. 4. Die auf ein Teilchen entfallende mittlere Energie E_0/A als Funktion von A für die Isobare $A = 16$.

Man kann natürlich diese Berechnungen, die wir hier für die stabilsten Isobare durchführten, auf beliebige andere Kerne ausdehnen. Wir können z. B. die Energie der Glieder einer Isobarenreihe berechnen, indem wir A konstant halten und die Energie für verschiedene vorgegebene Werte von Z bestimmen. Wir haben dies für eine kleine, eine mittlere und eine grosse Massenzahl und zwar für $A = 16$, $A = 80$ und $A = 200$ durchgeführt und die Energiekurven in den Figuren 4, 5 und 6 dargestellt. Wie aus einem Vergleich der Kurven zu sehen ist, verläuft die Energiekurve der schweren Isobare bedeutend flacher als die der leichten. Das Minimum der Energie liegt für die Isobare

$A = 16$ bei $Z = 8$ für die Isobare $A = 80$ bei $Z = 37$ und für die Isobare $A = 200$ bei $Z = 86$. Dass der letztere Z -Wert von dem aus der Formel (199) bestimmten Z -Wert — der in der Tabelle 1 angegeben ist — um rund 1% abweicht, ist eine Folge dessen, dass die Formel (199) aus der Entwicklung (198) des Ener-

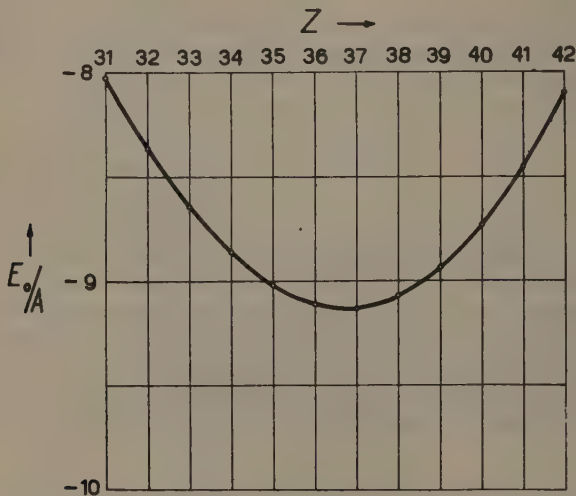


Fig. 5. Die auf ein Teilchen entfallende mittlere Energie E_0/A als Funktion von A für die Isobare $A = 80$.

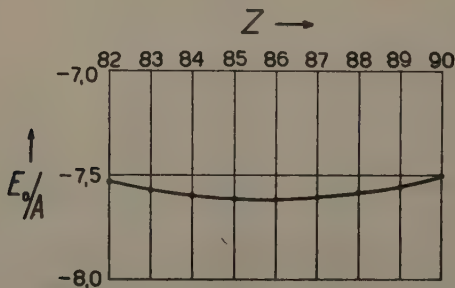


Fig. 6. Die auf ein Teilchen entfallende mittlere Energie E_0/A als Funktion von A für die Isobare $A = 200$.

gieausdruckes (196) hergeleitet wurde, während den hier durchgeführten Berechnungen der vollständige Energieausdruck (196) zugrunde liegt.

Wir kommen nun auf die Dichteverteilung der Nucleonen im Kern zu sprechen. Mit den Gleichungen (144) und (145) und mit Rücksicht auf die

Beziehungen (138)—(140) lässt sich die Dichteverteilung aller Nucleonen (Neutronen + Protonen) folgendermassen darstellen

$$\varrho = \varrho_n + \varrho_p = \varrho_0 e^{-3x^2} = \varrho_0 e^{-a^2 \left(\frac{r}{r_0}\right)^2}, \quad (201)$$

wo

$$\varrho_0 = \frac{c_n^3 + c_p^3}{24\pi^2 r_0^3} = \frac{c^3}{12\pi^2 r_0^3} \quad (202)$$

die Nucleonendichte im Kernmittelpunkt ist. Für die Parameter c und a sind die dem Energieminimum entsprechenden Werte dieser Parameter c_0 und a_0 einzusetzen, wo zwischen a_0 und c_0 gemäss (140) der Zusammenhang

$$a_0 = \frac{2^{1/3}}{2(9\pi)^{1/6}} \frac{c_0}{A^{1/3}} \quad (203)$$

besteht. Nach (202) ist also ϱ_0 zu c^3 proportional und zwar mit einem von A unabhängigen universalen Proportionalitätsfaktor.

Die Werte von c_{00} sind für mehrere stabilste Isobare in der Tabelle 1 zusammengestellt. Wie man sieht, ist c_{00} für die mittelschweren und schweren Kerne, d. h. etwa für $A > 50$ von A praktisch unabhängig und zwar zeigt c_{00} für diese Kerne von dem Wert $c_{00} \cong 7,0$ eine maximale relative Abweichung von nur cca. $\pm 2\%$. Zufolge dieses Verhaltens von c_{00} für $A > 50$ ergibt sich, dass für diese Kerne auch die Nucleonendichte im Kernmittelpunkt, ϱ_0 , praktisch konstant ist und von dem Wert

$$\varrho_0 = \frac{7^3}{12\pi^2 r_0^3} = 2,90 \frac{1}{r_0^3} = 1,16 \cdot 10^{30} \text{ cm}^3 \quad (204)$$

eine maximale relative Abweichung von nur cca. $\pm 6\%$ aufweist. In dem Gebiet $A > 50$ weist ϱ_0 ein sehr flaches Maximum bei $A \cong 120$ auf. Von $A = 50$ bis $A = 4$ ist die Abhängigkeit der Nucleonendichte im Kernmittelpunkt von der Massenzahl bedeutend stärker und zwar fällt ϱ_0 in Richtung kleinerer Massenzahlen monoton ab und erreicht bei $A = 4$ cca. die Hälfte des Wertes (204). Man vgl. hierzu die in der Tabelle 3 angegebenen Werte von ϱ_0 . Für ganz leichte Kerne machen sich im Verlauf von ϱ_0 als Funktion von A Schwankungen bemerkbar, und zwar liegen die Werte von ϱ_0 für gerade A etwas höher und für ungerade etwas tiefer als es dem glatten Verlauf entsprechen würde. Der Grund hierfür ist derselbe, wie im Falle der auf S. 374 besprochenen Schwankungen der mittleren Energien.

In der weitgehenden Konstanz der Nucleonendichte im Kernmittelpunkt für mittelschwere und schwere Kerne kommt das bekannte empirische Kerngesetz zum Ausdruck, dass für diese Kerne die Nucleonendichte im Kerninneren von der Massenzahl unabhängig ist.

Nach diesen Feststellungen wollen wir uns mit dem Dichteverlauf der Nucleonen in verschiedenen Kernen und in Zusammenhang damit mit der Berechnung der Kernradien befassen. Die Dichte ρ als Funktion von r haben wir für einen leichten, einen mittelschweren und einen schweren Kern und zwar für die Kerne mit den Massenzahlen 16, 80 und 200 in Fig. 7 dargestellt.

Ausser der Dichte ρ ist noch die radiale Dichteverteilung

$$D = 4\pi r^2 \rho \quad (205)$$

von Wichtigkeit, die wir ebenfalls für die Kerne mit den Massenzahlen 16, 80 und 200 in Fig. 8 dargestellt haben. Während ρ die Anzahl der Nucleonen in der

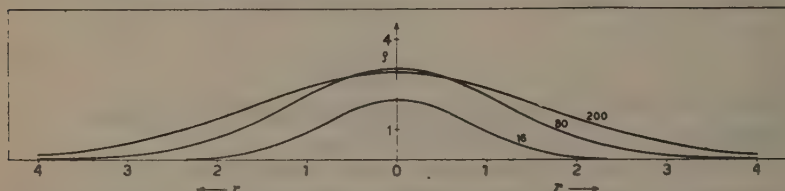


Fig. 7. Die Nucleondichte ρ als Funktion von r für die Kerne $A = 16, Z = 8$; $A = 80, Z = 37$; $A = 200, Z = 85$. Die neben den Kurven stehenden Zahlen sind die Massenzahlen der betreffenden Kerne.

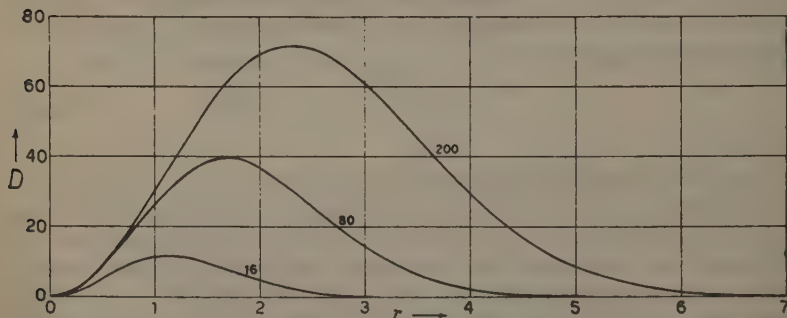


Fig. 8. Die radiale Nucleondichte D als Funktion von r für die Kerne $A = 16, Z = 8$; $A = 80, Z = 37$; $A = 200, Z = 85$. Die neben den Kurven stehenden Zahlen sind die Massenzahlen der betreffenden Kerne.

Volumeneinheit ist, gibt Ddr die Anzahl der Nucleonen, die sich zwischen den Kugelflächen mit den Radien r und $r + dr$ befinden.

Nachdem wir uns über den Dichteverlauf und die radiale Dichteverteilung der Nucleonen in leichten, mittelschweren und schweren Kernen orientiert haben, kommen wir auf den Kernradius zu sprechen, dessen Definition bei weitem nicht so einfach ist, wie dies in einigen Arbeiten angenommen wird.

Im Falle einer vollkommen konstanten Kerndichte pflegt man als Kernradius denjenigen Radius zu definieren, bis zu welchem die konstante Kerndichte ausläuft und der sich nach (133) zu $A^{1/3}$ als proportional erweist. In diesem Fall ist also der Kernradius der Radius der mit Nucleonen homogen gefüllten Kugel. Wenn wir von dieser Definition ausgehend als Kernradius ganz allgemein denjenigen r -Wert definieren, für welchen — bei Annäherung an den Kern — die Kerndichte beträchtliche Werte anzunehmen beginnt, so bieten sich in unserem Falle, wo die Nucleondichte — im Gegensatz zum eben erwähnten Fall der konstanten Dichte — nicht unstetig, sondern stetig auf Null abfällt zur Definition eines Kernradius mehrere Möglichkeiten, von denen wir zwei, die uns am besten begründet erscheinen, besprechen wollen.

Die eine Möglichkeit besteht in der Annahme, dass der Kernradius R zu dem statistischen Mittelwert von r proportional ist. Für den statistischen Mittelwert von r ergibt sich mit Rücksicht auf (201), (202) und (140)

$$\bar{r} = \frac{1}{A} \int r \varrho dv = \frac{4\pi}{A} \int_0^\infty \varrho r^3 dr = \frac{4\pi \varrho_0}{A} \int_0^\infty r^3 e^{-a^2 r^2} r_0^3 dr = 4 \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{c_0} A^{1/3} r_0. \quad (206)$$

Wenn wir uns auf die stabilsten mittelschweren und schweren Kerne beschränken, so können wir hier für c_0 mit einem maximalen Fehler von 2% den Wert $c_{00} = 7,0$ einsetzen, mit dem sich

$$\bar{r} = 0,447 A^{1/3} r_0 \quad (207)$$

ergibt. Für $A = 80$ und $A = 200$ erhält man hieraus $\bar{r} = 1,92 r_0$ bzw. $\bar{r} = 2,61 r_0$. Wie man sich an Hand der Fig. 7 überzeugt, ist bei diesen Entfernungen die radiale Nucleondichte bei weitem noch nicht abgeklungen, sondern besitzt noch einen beträchtlichen Wert, demzufolge \bar{r} unserer Definition des Kernradius nicht entspricht. Wie man ebenfalls aus der Fig. 7 sieht, würde aber unsere Definition des Kernradius eine zu \bar{r} proportionale Länge, etwa das 2-fache von \bar{r} , sehr gut entsprechen. Man hätte dann also

$$R = 2\bar{r} = 8 \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{c_0} A^{1/3} r_0, \quad (208)$$

woraus man für mittelschwere und schwere Kerne mit $c_0 = c_{00} \approx 7,0$ den Ausdruck

$$R = 0,894 A^{1/3} r_0 \quad (209)$$

erhält. Mit Ausnahme der leichten Kerne würde sich also der Kernradius zu $A^{1/3}$ proportional ergeben. Für leichte Kerne besteht aber diese Proportionalität nicht, da man dort c_{00} nicht mehr als konstant betrachten kann; man vgl. hierzu die in der vierten Spalte der Tabelle 3 zusammengestellten R -Werte, die aus (208) mit den in der Tabelle 1 angegebenen c_{00} -Werten berechnet wurden.

Die andere Möglichkeit einen Kernradius im oben erwähnten Sinne zu definieren, besteht darin, dass man diesen als den Radius derjenigen Kugel

definiert, ausserhalb der sich eine für alle Kerne konstante Nucleonenmenge η von der Grössenordnung eines Nucleons befindet. Es ist also dann R durch folgende Gleichung definiert

$$\int_R^{\infty} D \, dr = \eta. \quad (210)$$

Wegen des sehr steilen Abfalls von D bei grösseren r -Werten ist R gegenüber einer Änderung von η nicht sehr empfindlich. Man erhält z. B. für den in der Tabelle 1 angegebenen Kern $A = 120$, $Z = 54$ ($c_{00} = 7,157$) mit $\eta = 1$ den Wert $R = 4,63 \, r_0$ und mit $\eta = 1/2$ den Wert $R = 4,88 \, r_0$. Wir haben $\eta = 1/2$ gesetzt und erhielten so die in der fünften Spalte der Tabelle 3 angeführten Resultate, wobei für c_{00} und Z die in der zweiten bzw. vierten Spalte der Tabelle 1 angegebenen Werte benutzt wurden.

Bei einem Vergleich der auf diese Weise hergeleiteten Kernradien mit den empirischen stösst man auf eine Schwierigkeit, die nicht nur hier, sondern immer auftritt, wenn man den Kernradius in der allgemein üblichen Weise als denjenigen Wert von r definiert, für welchen — bei Annäherung an den Kern — die Nucleondichte beträchtliche Werte anzunehmen beginnt. Die Schwierigkeit entsteht dadurch, dass die empirischen Kernradien aus Streuversuchen mit α -Teilchen und Neutronen, sowie aus dem α -Zerfall in der Weise abgeleitet sind, dass man als Kernradius denjenigen r -Wert betrachtet, bei welchem sich die zwischen den Nucleonen wirkenden nicht Coulombschen Kräfte bemerkbar machen. Die so definierten Kernradien werden natürlich wegen der sehr kurzen

TABELLE 3

Kernradien und Nucleondichte im Kernmittelpunkt. R in r_0 -Einheiten, ρ_0 in $1/r_0^3$ -Einheiten.

A	Theoretisch				R empirisch
	Z	ρ_0	R aus (208) berechnet	R aus (210) berechnet	
4	2	1,44	1,79	1,34	1,67
5	2	1,22	2,04	1,59	1,80
6	3	1,45	2,04	1,65	1,91
8	4	1,55	2,20	1,87	2,10
10	5	1,66	2,32	2,03	2,26
12	6	1,77	2,41	2,16	2,40
16	8	1,96	2,56	2,39	2,65
20	10	2,13	2,69	2,56	2,85
40	19	2,66	3,14	3,26	3,59
60	28	2,91	3,49	3,74	4,11
80	37	3,04	3,79	4,17	4,52
100	45	3,07	4,07	4,55	4,87
120	54	3,10	4,31	4,88	5,18
140	62	3,07	4,55	5,21	5,45
160	70	3,03	4,78	5,54	5,70
180	77	2,95	5,01	5,85	5,93
200	85	2,90	5,22	6,13	6,14
220	92	2,82	5,44	6,46	6,34
240	99	2,75	5,65	6,76	6,53

reichweite der Kernkräfte mit den weiter oben definierten theoretischen grössendungsmässig übereinstimmen, eine genauere Übereinstimmung ist aber nicht zu erwarten. Man kann jedoch erwarten, dass die theoretischen Kernradien denselben Gang mit A aufweisen, wie die empirischen. Um zu Kernradien zu gelangen, die auf die gleiche Weise definiert sind, wie die empirischen, hätte man das Streuvermögen einer Nucleonengaskugel mit der hier bestimmten Dichtevertellung gegenüber α -Teilchen, Protonen oder Neutronen zu berechnen, was in einer späteren Untersuchung durchgeführt werden soll.

Hier begnügen wir uns mit einem Vergleich der hier berechneten Kernradien mit den empirischen, welch' letztere zu $A^{1/3}$ proportional sind und durch die Formel

$$R = 1,42 A^{1/3} 10^{-13} \text{ cm} = 1,05 A^{1/3} r_0 \quad (211)$$

dargestellt werden können.²⁶ Die aus dieser Formel für mehrere A -Werte berechneten Kernradien sind in der sechsten Spalte der Tabelle 3 eingetragen. Wie zu sehen ist, stimmen die hier erhaltenen theoretischen Werte mit diesen gut überein. Im Hinblick auf das weiter oben Gesagte, ist es nicht so sehr die gute zahlenmässige Übereinstimmung auf die es hier ankommt, sondern der Umstand, dass die theoretischen Kernradien praktisch denselben Gang mit A zeigen, wie die empirischen. Ein in dieser Richtung besonders befriedigendes Verhalten zeigen die aus der Formel (210) berechneten Kernradien, die in der fünften Spalte der Tabelle 3 angegeben sind. Dies ist umsomehr befriedigend, als die der Formel (210) zugrunde liegende Definition des Kernradius, wegen der verhältnismässig starken Unempfindlichkeit von η , als physikalisch sehr plausibel erscheint.

§ 11. Vergleich mit der wellenmechanischen Berechnung des Deuterons

Es ist noch von Interesse den im Vorangehenden erhaltenen Parameterwert λ mit demjenigen zu vergleichen, den man auf Grund der Wellenmechanik für einen ganz leichten Kern, z. B. für das Deuteron erhält. Hierzu berechnen wir mit dem Ansatz (47) die Schrödingersche Energie des Deuterons. Es ergibt sich

$$E = 4\pi \frac{h^2}{8\pi^2 M_r} \int_0^\infty P'^2 dr + 4\pi \int_0^\infty J(r) P^2 dr, \quad (212)$$

wo $M_r = \frac{1}{2} M$ ist, weiterhin P das r -fache der auf 1 normierten Eigenfunktion und P' die Ableitung von P nach r bezeichnet.

Wir bestimmen auch hier E , bzw. den Parameterwert λ mit Hilfe des Ritzschen Verfahrens und machen für P den Ansatz

$$P = \left(\frac{a}{2r_0} \right)^{3/2} \frac{1}{\pi^{1/2}} r e^{-a \frac{r}{2r_0}}, \quad (213)$$

wo a einen Variationsparameter bezeichnet.

Mit diesem Ausdruck von P lässt sich mit Rücksicht auf (47), (19), (114) und (102) die Energie in folgender Form darstellen.

$$E = 2\kappa_J \frac{1}{r_0^2} a^2 - \frac{\gamma}{2r_0} \frac{a^3}{(1+a)^2} = \left| 2\mu_K a^2 - \frac{\lambda}{2} \frac{a^3}{(1+a)^2} \right| \varepsilon_0. \quad (214)$$

Man hat nun denjenigen Wert von a zu bestimmen, für den E ein Minimum aufweist und den frei verfügbaren Parameter so zu wählen, dass dieses Minimum mit dem empirischen Wert der Bindungsenergie des Deuterons $E_0 = -2,19 \text{ MeV}$ übereinstimmt. Man erhält

$$a = 1,67 \quad \text{und} \quad \lambda = 3,228. \quad (215)$$

Dieser λ -Wert ist nur um weniger als 3% kleiner als derjenige, den wir für das statistische Kernmodell mit konstanter Dichte im § 8 erhielten. Im Verhältnis zu dem mit dem vollständigen Energieausdruck erhaltenen λ -Wert (200) ist der Unterschied grösser, beträgt aber auch für diesen nur rund 22% dieses Wertes. Dieser Unterschied wird sich jedoch in der nächsten Näherung des statistischen Modells, bei der die Neutronen- und Protonendichte voneinander unabhängig variiert werden, und die Korrelation der Nucleonen berücksichtigt wird (man vgl. § 10), noch verringern, da hieraus zusätzliche Anziehungen resultieren, was zu einer Verkleinerung des im § 10 erhaltenen λ -Wertes führt.

§ 12. Diskussion der Resultate und der möglichen Erweiterungen

Die mit der hier entwickelten ersten Näherung des Variationsverfahrens erhaltenen Resultate für die Kernenergien und Kernradien kann man als sehr befriedigend bezeichnen, insbesondere wenn man berücksichtigt, dass nur ein empirischer Parameter benutzt wird und das Verfahren von willkürlichen Annahmen frei ist. Bemerkenswert ist weiterhin, dass sich der empirische Parameterwert λ für das statistische Modell und für das wellenmechanische Modell des Deuterons nur wenig unterscheidet, und der Unterschied sich in den weiteren Näherungen noch verringert.

Es fragt sich nun, wie sich die weiteren Näherungen gestalten und was man von diesen erwarten kann? Der nächste Schritt wäre eine voneinander unabhängige Variation der Neutronen- und Protonendichte, woraus ein Herabsinken der Coulombschen Abstossungsenergie resultiert. Dieses Herabsinken der Energie macht sich hauptsächlich für schwere Kerne — bei welchen die Coulombsche Energie relativ gross ist — bemerkbar. Bei dieser zweiten Näherung kann man also eine kleine Vertiefung der Energie erwarten und zwar in einem mi-

wachsendem A steigendem Masse. Es wird also der Anstieg der Energiekurve von den mittelschweren Kernen bis zu den schwersten Kernen etwas kleiner. Wenn man die so erhaltene Energiekurve in Richtung wachsender Energie verschiebt — was durch eine Verkleinerung des Parameterwertes λ erreicht werden kann — so wird die neue Energiekurve die empirischen Werte noch besser approximieren.

Eine weitere Verbesserung des Dichteverlaufes in den höheren Näherungen des Variationsverfahrens wird durch die Erweiterung des Variationsansatzes (136) erreicht, indem man im Ansatz (135) in der Summe noch weitere Glieder berücksichtigt und hierdurch der Dichtefunktion die bessere Anpassungsmöglichkeit an den tatsächlichen Verlauf verschafft.

Eine andere Weiterentwicklung der hier gegebenen Ansätze besteht in einer Korrektur der Anziehungsenergie, indem man diese mit der aus der Korrelation der Nucleonen resultierenden Energie erweitert,²⁷ woraus eine zusätzliche Anziehung resultiert.

Man könnte auch noch an der kinetischen Energie durch die Unterteilung der Nucleonen nach der Nebenquantenzahl eine Verbesserung anbringen.²⁸

Weiterhin könnte man noch versuchen einen Teil der Nucleonen als fertige α -Teilchen in den Kern einzubauen und den Prozentsatz dieser Nucleonen ebenfalls aus dem Minimumprinzip bestimmen.

Abschliessend sei nun noch erwähnt, dass man nach Heisenberg²⁹ annehmen muss, dass die Kernkräfte höchstwahrscheinlich nicht durch eine einzige Teilchensorte, sondern durch ein ganzes Spektrum schwerer Teilchen (Mesonen) verschiedenster Masse und Eigenschaften hervorgerufen werden, von denen die π -Mesonen sich nur dadurch auszeichnen, dass sie die leichtesten und somit die durch sie hervorgerufenen Kräfte diejenigen von grösster Reichweite sind, wodurch der Ansatz (47) für nicht zu kleine gegenseitige Abstände der Teilchen gerechtfertigt wird. Eine Erweiterung der Theorie durch Berücksichtigung dieser zusätzlichen Kräfte mit sehr kurzer Reichweite wird allerdings erst dann möglich sein, wenn man über die Eigenschaften dieser Kräfte näher orientiert ist.

Auf die weiter oben besprochenen höheren Näherungen bzw. Erweiterungen der Theorie, die ohne Weiteres durchgeführt werden können, möchte ich in einigen demnächst folgenden Arbeiten zurückkommen.

Mathematischer Anhang

Berechnung der Integrale $L(q)$, $K(q)$, $H(q)$ und $M(q)$

Die Integrale $L(q)$, $K(q)$, $H(q)$ und $M(q)$ sind durch (160) — (163) definiert. Für $q < 1$ kann man sie geschlossen nicht auswerten. Wir haben die Integrale $L(q)$, $K(q)$ und $M(q)$ für 18 verschiedene q -Werte ($q > 1$) und das Integra¹

$H(q)$ für 8 verschiedene q -Werte ($q > 1$) auf numerischem Wege bis auf 4 Stellen genau bestimmt, und die Integralwerte, sowie die mit diesen berechnete Funktion $F(q)$ in der Tabelle 4 zusammengestellt. Die im § 10 angegebenen Resultate haben wir mit diesen Integralwerten erhalten.

Für die Integrale $K(q)$, $H(q)$ und $M(q)$ kann man Näherungsformeln herleiten, die die exakten Integrale in dem für die Berechnungen wichtigsten Intervall von q ($5 < q < 8$) ausgezeichnet annähern. Wenn wir uns auf dieses Intervall von q beschränken, so sind die Integranden in allen drei Integralen Produkte einer Funktion mit einem schmalen und steilen Maximum vom Typ $f(x) = x^2 e^{-nx^2}$ ($n = 2, 3, 4$), die mit Ausnahme der Umgebung des Maximums praktisch Null ist und einer in der Umgebung des Maximums von $f(x)$ sich verhältnismässig langsam veränderlichen Funktion $\ln(1 + q^2 e^{-2x^2})$ oder $\arctg(1 + q e^{-x^2})$, für die wir zur Abkürzung die gemeinsame Bezeichnung $g(x)$ einführen. Nach dem Mittelwertsatz der Integralrechnung kann man im Integral $\int_{\frac{1}{q}}^{\infty} f(x) g(x) dx$ die eine Funktion, z. B. die flach verlaufende Funktion $g(x)$ durch einen entsprechend gewählten konstanten Wert ersetzen. Wegen des schon beschriebenen Verlaufes von $f(x)$ erhält man für das Integral einen guten Näherungswert, wenn man für den konstanten Wert von $g(x)$ denjenigen

TABELLE 4

Die auf numerischem Wege bis auf 4 Stellen genau berechneten Werte der Integrale $L(q)$, $K(q)$, $H(q)$ und $M(q)$, sowie die mit diesen Integralwerten ebenfalls bis auf 4 Stellen genau berechnete Funktion $F(q)$. Die mit* bezeichneten $H(q)$ -Werte sind mit der Näherungsformel (222) berechnet; diese Näherungswerte sind um cca 0,7% grösser als die exakten.

q	$L(q)$	$K(q)$	$H(q)$	$M(q)$	$F(q)$
1,3355	0,2228	0,07044	0,03619	0,05908	0,02530
1,8951	0,3889	0,1149	0,05735	0,07302	0,06126
2,8427	0,6930	0,1857	0,08901	0,08818	0,1526
3,6600	0,9392	0,2357	0,1111*	0,09602	0,2464
4,0998	1,099	0,2656	0,1227	0,09991	0,3164
4,7378	1,300	0,3006	0,1369	0,1039	0,4131
5,4000	1,503	0,3336	0,1510*	0,1071	0,5205
6,0000	1,682	0,3611	0,1619*	0,1096	0,6229
6,6329	1,865	0,3879	0,1714	0,1117	0,7349
7,1000	1,997	0,4064	0,1794*	0,1130	0,8203
7,5000	2,107	0,4215	0,1852*	0,1141	0,8945
7,7500	2,176	0,4306	0,1888*	0,1147	0,9416
8,0000	2,242	0,4394	0,1921*	0,1152	0,9891
8,2500	2,310	0,4481	0,1954*	0,1158	1,037
8,5280	2,384	0,4574	0,1990*	0,1163	1,091
9,0000	2,505	0,4727	0,2048*	0,1172	1,183
9,3636	2,601	0,4840	0,2079	0,1178	1,255
11,9173	3,216	0,5540	0,2340	0,1211	1,774

Wert von $g(x)$ wählt, den $g(x)$ an der Stelle x_m des steilen Maximums von $f(x)$ annimmt. Es ergibt sich so

$$\int_0^{\infty} f(x)g(x) dx = g(x_m) \int_0^{\infty} f(x) dx = g(x_m) \frac{\pi^{1/2}}{4n^{3/2}} \quad (216)$$

mit

$$x_m = \frac{1}{n^{1/2}}. \quad (217)$$

Die Genauigkeit dieser Näherung reicht für unsere Zwecke noch nicht aus. Man gelangt jedoch sofort zu einer Näherungsformel mit ausreichender Genauigkeit, wenn man in der Formel (216) $g(x_m)$ durch $\frac{1}{2}[g(x_1) + g(x_2)]$ ersetzt, wo x_1 und x_2 diejenigen Abszissenwerte sind, bei denen $f(x)$ den halben Wert des Maximums, d. h. den Wert $\frac{1}{2}f(x_m)$ annimmt. Man hat dann also

$$\int_0^{\infty} f(x)g(x) dx = \frac{1}{2} [g(x_1) + g(x_2)] \frac{\pi^{1/2}}{4n^{3/2}}, \quad (218)$$

wo x_1 und x_2 die beiden Lösungen der transzendenten Gleichung

$$f(x) = x^2 e^{-nx^2} = \frac{1}{2} f(x_m) = \frac{1}{2n} e^{-1} \quad (219)$$

bezeichnen, für die sich

$$x_1 = \left(\frac{0,2320}{n}\right)^{1/2}, \quad x_2 = \left(\frac{2,678}{n}\right)^{1/2} \quad (220)$$

ergibt.

Wenn man in (216) für $f(x)$ und $g(x)$ die ursprünglichen Funktionen wieder einsetzt, so gelangt man für die Integrale $K(q)$, $H(q)$ und $M(q)$ zu folgenden sehr guten Näherungsformeln

$$\left. \begin{aligned} K(q) &= \int_0^{\infty} x^2 e^{-2x^2} \ln(1 + q^2 e^{-2x^2}) dx = \\ &= \frac{1}{16} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} [\ln(1 + q^2 e^{-2x_1^2}) + \ln(1 + q^2 e^{-2x_2^2})] \\ x_1 &= \left(\frac{0,2320}{2}\right)^{1/2}, \quad x_2 = \left(\frac{2,678}{2}\right)^{1/2}; \end{aligned} \right\} \quad (221)$$

mit

$$\left. \begin{aligned} H(q) &= \int_0^{\infty} x^2 e^{-4x^2} \ln(1 + q^2 e^{-2x^2}) dx = \\ &= \frac{\pi^{1/2}}{64} [\ln(1 + q^2 e^{-2x_1^2}) + \ln(1 + q^2 e^{-2x_2^2})] \\ x_1 &= \left(\frac{0,2320}{4}\right)^{1/2}, \quad x_2 = \left(\frac{2,678}{4}\right)^{1/2}; \end{aligned} \right\} \quad (222)$$

mit

$$\left. \begin{aligned}
 M(q) &= \int_0^{\infty} x^2 e^{-3x^2} \operatorname{arctg} (1 + qe^{-x^2}) dx = \\
 &= \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/2} [\operatorname{arctg} (1 + qe^{-x_1^2}) + \operatorname{arctg} (1 + qe^{-x_2^2})] \\
 x_1 &= \left(\frac{0,2320}{3} \right)^{1/2}, \quad x_2 = \left(\frac{2,678}{3} \right)^{1/2}
 \end{aligned} \right\} \quad (223)$$

Für die Näherungsformel für $K(q)$ ist die maximale Abweichung vom exakten Wert im Intervall $5,4 < q < 10$ kleiner als 0,6% und im Intervall $4 < q < 5,4$ kleiner als 1,2%. Bei der Näherungsformel für $H(q)$ ist der maximale Fehler im Intervall $4 < q < 10$ kleiner als 0,7%. Die beste Approximation gibt die Näherungsformel für $M(q)$, bei welcher der maximale Fehler im Intervall $1,5 < q < 10$ kleiner ist als 0,4%.

Da das Integral $H(q)$ in den Energieausdruck des Kerns nur in ein Glied von untergeordneter Bedeutung eingeht, kann man für $H(q)$, statt der exakten Werte, die aus der Näherungsformel (222) berechneten Werte gebrauchen. Einige mit dieser Näherungsformel berechnete Werte sind in der Tabelle 4 angegeben.

Für das Integral $L(q)$ lässt sich die hier durchgeführte Näherung natürlich nicht anwenden, da bei $L(q)$ im Integranden der Faktor e^{-nx^2} fehlt, der das für unsere Näherung wesentliche rasche Verschwinden von $f(x)$ mit wachsendem x bedingt. Da $L(q)$ im eingangs angegebenen Intervall als Funktion von q angenähert linear verläuft, lässt sich $L(q)$ in diesem Intervall sehr gut durch eine einfache Formel approximieren, deren Koeffizienten man mit der Methode der kleinsten Quadrate bestimmen kann. Man findet, dass im Intervall $5 < q < 10$ die Näherungsformel

$$L(q) = -0,0051755 q^2 + 0,35220 q - 0,24814 \quad (224)$$

die exakten Integralwerte mit einem kleineren Fehler als 1% darstellt. Da dieses Integral bei der Berechnung von $F(q)$ neben den übrigen Gliedern in $F(q)$ nur eine untergeordnete Bedeutung besitzt, reicht diese Genauigkeit vollkommen aus.

Wir haben die Näherungsformeln für $K(q)$, $H(q)$, $M(q)$ und $L(q)$ hier einerseits wegen ihrer Einfachheit und andererseits aus dem Grunde angegeben um zu zeigen, dass das ganze Variationsverfahren mit geringer Mühe durchführbar ist, was für die Weiterentwicklung des Verfahrens wesentlich ist.

Die numerischen Rechnungen wurden von meinen Assistenten Frl. O. Kunvári, Frl. E. Mágóri, Herrn B. Molnár und Frl. E. Szabó durchgeführt; die Figuren wurden von den Herrn Assistenten G. Knapcz und L. Zelenka gezeichnet. Ich möchte Ihnen allen auch an dieser Stelle für Ihre Arbeit meinen Dank aussprechen.

LITERATURANGABEN UND HINWEISE

1. E. Majorana, Zs. f. Phys. **82**, 137, 1933.
2. W. Heisenberg, Rapport du VII-ième Congrès Solvay, Paris, 1934.
3. C. F. v. Weizsäcker, ZS. f. Phys. **96**, 431, 1935.
4. C. F. v. Weizsäcker, ZS. f. Phys. **96**, 431, 1935.; G. C. Wick, Nuovo Cimento Nr. 4, 1934; Rend. Accad. Lincei **19**, 319, 1934; **21**, 170, 1935; K. Nakabayasi, ZS. f. Phys. **97**, 211, 1935; S. Flüge, ZS. f. Phys. **96**, 459, 1935; F. S. Wang, ZS. f. Phys. **100**, 736, 1936. Bezüglich weiterer Literaturangaben vgl. man z. B. H. A. Bethe und R. F. Bacher, Rev. Mod. Phys. **8**, 82, 1936, weiterhin C. F. v. Weizsäcker, Die Atomkerne, Physik und Chemie und ihre Anwendungen in Einzeldarstellungen Bd. II., Akad. Verlagsges., Leipzig, 1937, sowie L. Rosenfeld, Nuclear Forces, Monographs on Theoretical and Applied Physics Vol. I, North-Holland Publishing Comp., Amsterdam, 1948.
5. Man vgl. z. B. C. F. v. Weizsäcker, l.c.
6. Man vgl. z. B. P. Gombás, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 7, Springer, Wien, 1949.
7. C. F. v. Weizsäcker, l. c.; man vgl. weiterhin P. Gombás, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 110. ff., wo auch die weitere diesbezügliche Literatur angegeben ist.
8. Man vgl. P. Gombás, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 116, Springer, Wien, 1949.
9. Man vgl. z. B. P. Gombás, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, S. 80 ff., Birkhäuser, Basel, 1950.
10. Man vgl. z. B. P. Gombás, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, S. 80 ff., Birkhäuser, Basel, 1950.
11. Näheres über die verschiedenen Typen der Kernkräfte findet man z. B. bei C. F. v. Weizsäcker, Die Atomkerne, Physik und Chemie und ihre Anwendungen in Einzeldarstellungen Band II, S. 58 ff., Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1937, oder L. Rosenfeld, Nuclear Forces, Monographs on Theoretical and Applied Physics Vol. I, North-Holland Publishing Comp., Amsterdam, 1948.
12. S ist das Doppelte des Spinnmoments eines Nucleons in der Einheit $\hbar/(2\pi)$ gemessen. Mit Rücksicht darauf, dass der Eigenwert des Quadrates des Spinnmoments in der Einheit $\hbar/(2\pi)$ gemessen $\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = \frac{3}{4}$ beträgt, ergibt sich, dass $S^2 = 3$ ist.
13. W. Heisenberg, Theorie des Atomkerns, S. 161, Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen, 1951.
14. Falls die Anzahl der Neutronen A_n , oder die der Protonen ungerade sein sollte, so wird der energetisch höchste unter den zu besetzenden Neutronen- oder Protonen-Bewegungszuständen nur je durch ein Teilchen besetzt, was aber im folgenden wegen der voraussetzungsgemäss grossen Anzahl der Teilchen keine Rolle spielt.
15. H. A. Bethe und R. F. Bacher, Rev. Mod. Phys. **8**, 155, 1936.
16. Bezüglich des Ausdruckes von ε_{ik}^{pp} vgl. man S. 347 und 348.
17. Man vgl. z. B. P. Gombás, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 23 ff., Springer, Wien, 1949.
18. Man vgl. hierzu auch W. Heisenberg, Theorie des Atomkerns, S. 72 ff., Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen, 1951.
19. Der Faktor $1/3^{1/2}$ wurde nur aus dem Grunde eingeführt, da mit diesem Faktor im Falle des Ansatzes (135) die Dichtefunktionen (144) und (145) frei von lästigen Faktoren werden.
20. Diesbezüglich vgl. man die Definitionsgleichungen (140) — (142), sowie die Gleichungen (182) und (183).
21. Bezüglich F und S vgl. man die weiter unten angegebenen Ausdrücke (187), (188) mit den Daten (189).
22. Wir kommen hierauf weiter unten zu sprechen, man vgl. (182) und (183).
23. Man könnte auch so vorgehen, dass man in $F(c)$ für die Integrale L , K und M die im Anhang angegebenen Näherungsausdrücke einsetzt, der so erhaltene Näherungsausdruck für $F(c)$ ist aber weniger genau als der Ausdruck (187).
24. Bezüglich der empirischen Werte vgl. man L. Rosenfeld, Nuclear Forces, Monographs on Theoretical and Applied Physics Vol. I, S. 501—528, North-Holland Publishing Comp., Amsterdam, 1948.

25. Aus einer Zusammenstellung von *L. Rosenfeld*, Nuclear Forces, Monographs on Theoretical and Applied Physics Vol. I. S. 501—528, North-Holland Publishing Comp., Amsterdam, 1948.

26. *L. Rosenfeld*, Nuclear Forces, Monographs on Theoretical and Applied Physics Vol. I S. 22 ff., North-Holland Publishing Comp., Amsterdam, 1948.

27. *E. Wigner*, Phys. Rev. (2) **46**, 1002, 1934 und Trans. Faraday Soc. **34**, 678, 1938. Man vgl. auch *P. Gombás*, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 27 ff., Springer, Wien, 1949.

28. Dies kann auf ähnliche Weise geschehen wie bei Atomen. Man vgl. hierzu *P. Gombás*, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 117, Springer, Wien, 1949; weiterhin *P. Gombás*, Acta Phys. Hung. Vol. I, No. 3, 1952.

29. *W. Heisenberg*, Die Theorie des Atomkerns, S. 161, Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen, 1951.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АТОМНЫХ ЯДЕР

П. Гомбаш

Резюме

§ 1. Введение. § 2. Основы статистической трактовки нуклеонов. § 3. Кинетическая энергия нуклеонов. § 4. О взаимодействии нуклеонов вообще. § 5. Энергия взаимодействия нуклеонов. § 6. Характер насыщения сил, происходящих из обменного взаимодействия. § 7. Статистическая модель атомного ядра. § 8. Статистическое ядро с постоянной плотностью нуклеонов. § 9. Определение распределения плотности и энергии методом Ритца. § 10. Результаты, относящиеся к энергии и распределению плотности ядра. § 11. Сравнение результатов с результатами волновой механики, относящихся к деутерию. § 12. Обсуждение результатов и дальнейших возможностей. Математическое приложение.

ON THE PHYSICAL INTERPRETATION OF THE LORENTZ TRANSFORMATION

By
L. JÁNOSSY

Central Research Institute for Physics, Budapest. Department for Cosmic Rays.

(Received 9. II. 1952.)

A detailed analysis is given of the classical consideration which led Einstein to postulate his interpretation of the Lorentz transformation. As the result of the analysis it is suggested that the Lorentz transformation can be better understood in terms resembling those of Lorentz and Fitzgerald than in those of Einstein. In particular it is suggested that the role of the velocity of light should not be regarded as that of an upper limit of the velocity of physical action but merely as the actual velocity of most physical actions.

I. Introduction

§ 1. At the first acquaintance with the theory of relativity, I had, like many other physicists, great difficulties in accepting the new conceptions about time and space. After having got more familiar with the ideas of relativity I came to accept them fully — but to my surprise exactly the same difficulties which had worried me earlier cropped up with my students when later I had to teach the theory. The question arises whether these difficulties are not after all real difficulties which we only persuade ourselves to have got over after having got familiar with the formalism of the theory. The formalism itself as distinct from the conceptual framework of the theory is highly consistent and leads to many quantitatively correct results.

As the result of detailed deliberations I have come to conclude that those ideas of relativity which are so difficult to accept at first can indeed be dispensed with, and starting from more familiar ideas the theory of relativity can be built up in a fashion where the physical context of the theory becomes essentially clearer than in the old view. This new version leads of course to no new results as the mathematical formalism is left without any change; the only essential difference between the old view and mine appears in connection with the question of the role of the light velocity and in connection with the question whether physical action can be propagated with over-light velocity.

In a second article we shall show that the modification proposed in the interpretation of the theory of relativity mitigates also certain difficulties in the interpretation of quantum phenomena. It appears therefore to us that

the conceptional difficulties of relativity theory and of quantum theory are essentially connected.

§ 2. The starting point of the theory of relativity was the negative outcome of the Michelson-Morley experiment and many other experiments of the kind. The Michelson-Morley experiment shows that light appears to be propagated isotropically with respect to the earth, no matter what the motion of the earth in space. Generalizing, it is concluded that the propagation of light appears to be isotropic simultaneously in all inertial systems K_0, K_1, \dots although these inertial systems may be in translational motion with respect to each other. There arises therefore the necessity to account for the experimental finding that the same light wave appears isotropic in two systems which are in relative motion to each other.

Let us consider a system K_0 , and let us assume that a spherical wave started at $t = 0$ from the origin of K_0 and that it is propagated in all directions with the velocity c . The equation of the position of this wave is then

$$x^2 + y^2 + z^2 - ct^2 = 0. \quad (1)$$

According to the pre-relativistic concepts this wave is not propagated isotropically relative to a system K_1 which moves with a velocity v in the direction of the positive x axis of K_0 . Indeed, to transform the coordinates x, y, z relative to K_0 into coordinates x', y', z' relative to K_1 we have to put

$$x' = x - vt, \quad y' = y, \quad z' = z \quad (2)$$

and we may add for the time

$$t' = t. \quad (3)$$

Equations (2) and (3) describe the Galilei transformation.

The equation of the light wave in K_1 becomes

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 - (c^2 - v^2)t'^2 - 2x't'v = 0. \quad (4)$$

Thus for $y' = z' = 0$, i. e. the part of the wave travelling along the x' axis, we have

$$c_{\pm x} = \frac{x'}{t'} = \pm c - v, \quad (5)$$

while for $x' = 0, z' = 0$, i. e. for the part travelling along the y' axis we have

$$c_{\pm y} = \frac{y'}{t'} = \pm \sqrt{c^2 - v^2}. \quad (6)$$

The Michelson-Morley experiment seems to show that

$$|c_{+x}| = |c_{-x}| = |c_{+y}| = |c_{-y}|$$

in contradiction with (5) and (6).

There are two possible consistent interpretations of the experimental result.

1. *Interpretation of Lorentz and Fitzgerald.* According to this interpretation the light wave is isotropic only in K_0 , K_0 being the system of reference which is at rest relative to the ether. In this view the electromagnetic waves are propagated as disturbances of the ether very much like sound waves propagated in air.

In the system K_1 the wave is not propagated any more isotropically but according to (4). The anisotropy is, however, thought to be compensated by a supposed deformation of the experimental arrangement. The original Lorentz hypothesis assumed that a rod moving with a velocity v relative to the ether suffers a contraction at the ratio $1:\sqrt{1-v^2/c^2}$ in its dimensions parallel to that of the direction of motion.

In order to account for other experimental results the latter hypothesis had to be extended, so that the following three distinct types of distortions which a material system suffers as the result of a motion relative to the ether were postulated:

1. length contraction at the ratio $1:\sqrt{1-v^2/c^2}$,
2. slowing down of rates of motions (i. e. slowing down of clocks) at a ratio $1:\sqrt{1-v^2/c^2}$,
3. phase shifts between clocks situated on a line along the direction of motion. The phase shift between two clocks situated at a distance x is

$$\Delta t = - \frac{vx}{c^2 - v^2}. \quad (7)$$

The minus sign indicates that clocks the further forward situated in the direction of motion, the more they are shifted back as the result of their motion relative to the ether.

We shall denote these three effects together as »Lorentz deformations«. The Lorentz deformations give a full account not only of the negative outcome of the Michelson-Morley experiment but also of all the other experiments like the Trouton-Noble experiment etc, which failed to show supposed effects caused by the motion of the earth with respect to the ether.

The unsatisfactory feature of the *Lorentz-Fitzgerald* hypothesis is the necessarily metaphysical concept of the ether which in itself represents »absolute rest«. The ether hypothesis becomes the more unsatisfactory since its only supposed properties are such that they make it impossible to observe the ether's state of motion. Indeed, as is well known, having two systems K_0 and K_1 in relative motion to each other it is quite irrelevant from the descriptive point of view whether it is assumed that K_0 is really at rest and Lorentz distortions appear in K_1 or whether it is assumed that not K_0 but K_1 is at rest and the distortions take place in K_0 instead of in K_1 . Both assumptions are in complete agreement with all known experiments.

2. *Einstein's interpretation.* Einstein tries to avoid the unsatisfactory concept of an all-embracing ether in which the world is supposed to be embedded.

Einstein's approach is this: It is argued that as there is no experiment which shows the light to be propagated anisotropically in any of the systems K_0 , K_1 , ... etc, therefore according to *Einstein* it is reasonable to assume, that the light in fact is propagated isotropically in all those systems. This assumption is, however, in contradiction with the Galilei transformation (2) and (3). Thus *Einstein* proposes to replace the Galilei transformation (2) and (3) by such a transformation which transforms an isotropically expanding light wave in K_0 into a similar light wave in K_1 . Thus the new coordinate transformation should be such that equation (1) transformed into K_1 should become not (4) but

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 - c'^2 t'^2 = 0.$$

From this the transformation itself can be derived with some slight additional assumptions. The additional assumptions are

a) that the new transformation is linear

b) that the systems K_0 and K_1 are entirely equivalent; i. e. the transformation from K_1 to K_0 can be obtained from that which leads from K_0 to K_1 , if we replace in the transformation formula v by $-v$.

The transformation thus obtained is the Lorentz transformation. One finds in the well-known way

$$c' = c.$$

Further

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = \frac{t - xv/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (8)$$

The strange feature of the transformation (8) is that the time is transformed, i. e. that in general $t \neq t'$.

In particular, two events which are simultaneous in one system of reference are in general not simultaneous as seen in another system. Further, the sequence of events may be different in two systems of reference. Suppose two events, A and B where A happens in a point P with the coordinates x_A, y_A, z_A at the time t_A , and B happens in a point Q with the coordinates x_B, y_B, z_B , at a time t_B . Times and coordinates all refer to the system K_0 . The two events happen in K_1 at times t'_A and t'_B with

$$\tau_{AB} = \frac{t'_A - t'_B}{t_A - t_B} = \left(1 - \frac{x_A - x_B}{t_A - t_B} \frac{v}{c^2}\right) / \sqrt{1 - v^2/c^2}. \quad (9)$$

If τ_{AB} is negative, then the sequence of the events A and B reverses when going from K_0 to K_1 . As seen from (9), for $v < c$, such a reversal can only take place provided

$$V_x = \left| \frac{x_A - x_B}{t_A - t_B} \right| > \left| \frac{c^2}{v} \right| \geq c.$$

V_x is the x -component of the constant velocity V of a signal which starts at the event A (supposing A is earlier than B as seen in K_0) and moving along

a straight line meets the event B in Q . We see that a reversal can only take place provided $V > c$.

Thus a Lorentz transformation can reverse the sequence of only such events which cannot be connected by a signal travelling with a velocity not exceeding that of light.

The reversal of the sequence of two unconnected events does not give rise to logical difficulties; logical difficulties would arise only then when events which can be regarded as cause and effect are reversed. Such difficulties would not arise, as pointed out by *Einstein*, if physical action was never propagated with a velocity exceeding that of light.

Thus, if we accept the Lorentz transformation (8) as the correct transformation of time and space coordinates, we have to postulate that no physical action can be transmitted with over-light velocity in order to avoid difficulties arising from the reversal of cause and effect. The latter postulate is not based on experience, it is necessary so as to avoid impossible consequences of *Einstein's* interpretation of the Lorentz transformation. It is true that all the well-known physical actions are propagated with exactly light velocity. These are: electromagnetic forces, nuclear forces, and gravitational forces.¹

These experimental (and speculative) results by no means prove that there could be no propagation of action with over-light velocity — these considerations at most show that from the point of view of the theory of relativity such an effect would give rise to great inconvenience.

In a second article we shall show that, in our opinion, a consistent formulation of quantum theory is possible only if action propagated with over-light velocity is introduced.

§ 3. Thus comparing the views of *Lorentz* and *Fitzgerald* on the one side and that of *Einstein* on the other we have to choose between the following:

1. Either we accept the Lorentz transformation not as the transformation of space and time but as describing the *deformations* which matter suffers when brought into motion relative to a system K_0 . With this view we encounter the difficulty that the state of motion of the system K_0 cannot be determined experimentally because the Lorentz deformations are of such a nature that they effectively hide the difference of two systems in relative motion to each other.

2. Alternatively, we may accept the Lorentz transformation as transformation of time and coordinates without reference to material systems. This

¹ The quantized electromagnetic forces and the nuclear forces are indeed propagated with light velocity; they are those forces which are binding ordinary matter and which are responsible for most physical properties of matter. The fact that these properties can be described in a Lorentz-invariant way proves that these forces are propagated with light velocity.

The question whether gravitational forces are propagated exactly with light velocity is a more involved question. The theory of general relativity shows that a weak gravitational field can, in first approximation, be derived from retarded potentials. Thus as far as we rely on the theory of general relativity we have to assume that gravitation is propagated in first approximation with light velocity.

interpretation dispenses with the metaphysical concept of absolute rest but leads to logical difficulties with the time transformation. These difficulties can be patched up when we ascertain that in Nature there is no action which is propagated with over-light velocity. The latter »patching up« is, however, not really satisfactory. We can never be assured experimentally that an over-light velocity cannot exist, say on some extra galactic system if not nearer home. To postulate that such a velocity does not exist, just because it does not suit our convenience (and because we happened not to have found such a velocity) is unsatisfactory.

My proposal of how to get out of the difficulties is on lines rather similar to those of Lorentz and Fitzgerald. I do not propose that there is one rigid K_0 system at absolute rest in which the whole universe is embedded. For such a phantastic conception there is no need whatever. I only suggest that in our close neighbourhood there is a system K_0 in which the light is propagated about isotropically; there is no need to suppose that this system can be extrapolated to large distances.

Although I have no detailed suggestion to make as to which system in the neighbourhood of the earth might play the role of K_0 , I would like to point out that the conception of such a system is quite straightforward. From the fact that with ordinary electromagnetic experiments we are unable to locate such a system we must not jump to the conclusion that there cannot be a future experiment which might lead to its location. And whether such a local K_0 system does or does not exist cannot depend on the present state of our knowledge.

The following suggestion as to the possible approach of how precisely to locate the K_0 system has a certain plausibility.

As is well known, we can determine experimentally whether or not a system is accelerated. The concept of an »absolute acceleration in space« is quite unsatisfactory and it was very satisfactory when through the general theory of relativity it became clear, that the effects of acceleration on a material system (i. e. centrifugal forces, inner stresses) can be understood as the gravitational reaction on the accelerated system of the surrounding system of fixed stars. It is thus obvious that there is no rigid acceleration free system embedding the whole of the world; if we suppose that the matter in the universe is streaming in a non-uniform manner, then the local systems which show no internal effects of acceleration will still be in accelerated motion relative to each other.

Just as acceleration is to be taken in comparison with the local motion of matter¹ we may in the same way measure velocity with reference to the same system, we may assume e. g. that the light is propagated isotropically

¹ »local« being here an elastic term and may mean e. g. the surrounding Galaxy; however, the present consideration is purely speculative, no detailed theory being attempted, therefore there is no need for the present purpose to go into more detail as to the precise meaning of the local system.

(or very nearly isotropically; see footnote) in the system K_0 about at rest as compared with the surrounding stars¹. In a system K_1 in translational motion with respect to K_0 the light is not propagated isotropically but the anisotropy cannot be detected directly because its effects are compensated by the Lorentz distortions.

Accepting such a view we might look at electromagnetic waves as some kind of »ripple« on the gravitational field, the propagation of this ripple being isotropic (or nearly isotropic) in a sufficiently homogeneous and stationary gravitational field. I am aware of the mathematical difficulties connected with such a concept — but here I only want to emphasize that such a picture is qualitatively possible and that on general grounds one cannot exclude a priori the concept of a system K_0 .

Before starting the actual analysis the following remark seems useful:

From the theory of relativity we know that we can choose practically any (acceleration free) system as the system K_0 because one system is as suitable as the other; in fact the objection against fixing a choice is precisely this, that we have no means to distinguish between various choices for the inertial systems. However, if we inspect why we have no means to distinguish between systems like K_0 and K_1 , we find that this incapability arises from our own prejudice, namely the prejudice that we require the distinction to be made with the help of a small piece of apparatus, like an interferometer. With such an apparatus the distinction is difficult indeed (although effects proportional to the derivatives of the g_{ik} 's might be expected even with a small apparatus). There is, however, no difficulty (except of prejudice to put matters into this light) to look round in the universe and to notice that the stars surrounding us do single out in a most impressive manner a particular inertial system, and that there is much astronomical work going on to determine this system precisely.

II. Kinematical aspects of Galilei and Lorentz transformations

§ 4. *Relativistic effects.* The relativity theory, starting from the negative results of the Michelson-Morley experiment and similar experiments, predicted some *positive* effects which later experimentally were found to exist. The most important relativistic effect from our point of view is the time contraction. Using the pre-relativistic terminology, we describe it as follows.

1. A clock set bodily into motion will slow down its rate of progress by a factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ as an effect of the acceleration.

The so-called clock paradoxon, which is experimentally proved to occur, consists in the following effect. Consider two clocks of equal construction exactly

¹ We disregard the small effects of the gravitation of the nearest bodies. Say, if we consider an experiment on the surface of the earth, then we neglect the bending of light in the gravitational field of the earth.

synchronized. We move away the one clock by accelerating it to a bodily velocity v inside a short time interval. (We have to be careful when accelerating the clock not to apply too large forces and thus not to damage the clockwork permanently.) The rate of the clock will now slow down as an effect of the acceleration. While the clock travels with a constant velocity v its rate is down. If after a time T the clock is brought to rest again, then its rate as clock is restored. The clock on its journey will have lost time; the amount of the loss is, when neglecting the periods of acceleration and deceleration

$$\Delta T = T(1 - \sqrt{1 - v^2/c^2}). \quad (10)$$

Developing in powers of v/c we have approximately

$$\Delta T \approx Tv^2/2c^2.$$

It is unimportant that we have neglected the periods of acceleration and deceleration as can be seen in the following manner. The disturbances during these periods may cause some phase shifts, say τ_1 and τ_2 , these shifts cannot possibly depend on T , the time of travel between acceleration and deceleration as the effect of acceleration cannot be supposed to depend on the previous history of the clock. Thus, whatever the actual values of τ_1 and τ_2 if we allow T to be sufficiently large, the loss of time on the journey will largely exceed the shifts τ_1 and τ_2 and thus ΔT as given in (10) is the dominant term in the exact expression for the shift.

The clock paradoxon can be observed experimentally on fast canal rays. Consider atoms with an emission frequency ν_0 when at rest. If such atoms are accelerated the frequency emitted by them will not be ν_0 but will depend on the direction of emission. In particular, perpendicular to the motion of the atoms the frequency emitted is

$$\nu_p = \nu_0 \sqrt{1 - v^2/c^2}. \quad (11)$$

The difference between ν_p and ν_0 is entirely due to the slowing down of the atomic frequency in the course of acceleration. Once the atoms of the canal ray are brought to rest they will emit again the original frequency ν_0 .

The perpendicular Doppler effect has been observed and the formula (11) has thus been verified experimentally.

A verification of the time contraction for extremely high velocities has been obtained through observations of the μ -meson decay.

μ -mesons are unstable elementary particles, they decay after a half-life of

$$\tau = 2.15 \mu \text{ sec}$$

into an electron and other neutral particles. The life-time of the μ -meson is appreciably increased when it moves with a velocity $v \approx c$. According to relativity theory the half-life of the moving μ -meson should be

$$\tau' = \tau / \sqrt{1 - v^2/c^2}. \quad (12)$$

since, however, the right hand expression in (12) depends critically on the small difference $c - v$, and since this small difference cannot be measured directly, at first one cannot conclude from experiment more than that

$$\tau' \gg \tau.$$

The latter relation certainly holds, since during the period τ a μ -meson cannot travel further than

$$c\tau = 350 \text{ m},$$

while μ mesons produced in the atmosphere at heights of 10—20 km are known to reach sea level with appreciable probability. This shows that the half-life τ' of the μ -meson in motion exceeds considerably τ that of the μ -mesons at rest. So as to interpret the experimental facts we have to assume that for many mesons

$$c\tau' \gg 10,000 \text{ m}.$$

A closer check of the relativistic formula (12) is obtained with the use of the relativistic expression for momentum. The actual measurements are compatible with

$$\tau' = \frac{E}{\mu c^2} \tau,$$

when $E = \mu c^2 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ is the relativistic energy of the meson and μ its mass.

While the perpendicular Doppler effect yields a quantitative experimental verification of the relativistic time contraction for not high velocities, the μ -meson observations demonstrate, at least qualitatively, the effect in regions where it amounts not merely to a small correction but where the relativistic time differs from the non-relativistic time by factors between 10 and 100.¹

2. The other important positive effect the theory of relativity predicts is the change of mass of a particle with velocity, the latter effect having been verified quantitatively. This effect is closely connected with the principle of the equivalence of mass and energy.

§ 5. *Galilei and Lorentz transformation. Mapping out of a system K_0 .* It was Einstein's important discovery that we cannot take for granted to have at our disposal systems of coordinates and possibility of time measurement in every part of a system. It is necessary to have physical methods for mapping out our system of reference and to calibrate clocks in different points of the system.

A simple mapping out of the system K_0 can be based on the assertion that light is propagated isotropically in K_0 . Assume thus a standard clock C_0 situated at the origin O of K_0 . With help of this clock we can now proceed to map out K_0 . We determine the distances of a number of points A, B, C, \dots from O by sending out light signals to these points, and measure the time intervals T_A, T_B, \dots in which the reflections of these signals return to O . We have to

¹ See for details e. g. L. Jánossy »Cosmic Rays«, 2nd edition, Oxford 1950.

ascertain that by repeating these experiments we get again and again the same values for any of the reflection times, thus we have to ascertain that the distances \overline{OA} , \overline{OB} , ... are constant in time. The distances themselves are found to be

$$\overline{OA} = cT_A/2, \quad \overline{OB} = cT_B/2, \dots$$

Furthermore, we can determine mutual distances between the points A , B , ... To get the distance \overline{AB} , we have to arrange by means of suitable mirrors for the signal to travel from O to A , then to B and finally to return to O . If the time for this is T_{AB} , then we have

$$\overline{AB} = c(2T_{AB} - T_A - T_B)/2.$$

In this way we can establish a complete network of points with known mutual distances; thus we can map out the system K_0 . We note, that in case of n points there are $m = n(n-1)/2$ mutual distances. Out of these m distances only $m_i = 3n - 6$ (for $n > 2$) are independent, the remaining $m - m_i$ distances can be determined from the former ones by the rules of Euclidean geometry. The experimental finding that these relations are indeed obeyed to a certain approximation shows that in such an approximation the Euclidean geometry is valid in K_0 . If the K_0 system is not an inertial system, or if there are appreciable gravitational fields at play, then we expect deviations from Euclidean geometry.

2. Once the system K_0 is mapped out in the above way we can proceed to synchronize clocks in all points A , B , etc. We may send signals from O at pre-arranged times, say at $t = 0, \tau, 2\tau, \dots$. At the arrival of these signals in A we have to adjust our clock there so as to give $t = a/c, \tau + a/c, 2\tau + a/c, \dots$. In this way we can synchronize clocks in all parts of K_0 and put them into step. Just as we could test the inner consistency of the mapping out of K_0 we can now test our system of clocks for inner consistency. We must demand that choosing any one of the clocks A , B , ... etc. instead of O and repeating the procedure of mapping and synchronizing of K_0 we obtain the same result as if we had started with O . If we show experimentally that this demand is indeed fulfilled, then we have proved that K_0 is not only Euclidean with respect to ordinary space geometry but also from the point of view of the four dimensional space time geometry.

3. In the preceeding considerations we have assumed that the points A , B , C ... are at fixed distances with respect to O and that they have also fixed mutual distances. We could drop these conditions and still carry out the calibration roughly in this manner: We send a signal at a time t_1 from O to A , this signal meets the (moving) point A at a time t' and the reflexion arrives at t_2 . We have then

$$t' = (t_1 + t_2)/2$$

and the distance $a(t')$ at this time is

$$a(t') = c(t_1 + t_2) / 2.$$

Continuously repeating such experiments we can establish all distances as functions of the time t as recorded at O , and we can also calibrate clocks situated in the points A , B , etc. The only difference to the previous procedure is that at the time of arrival in A of the signal sent from O , at t_1 , we do not yet know t_2 and therefore we learn the value of t' only later. Thus the clock in A can only be corrected some time after the receipt of the calibrating signal, once it has been established and communicated to A .

Further, when calibrating a non-rigid system, we cannot expect identical calibration if instead of O we start from say A the mapping and calibration. We discuss this problem in the paragraph further below.

If we start the mapping with a clock in A moving compared to O , then we get phase relations between distant clocks which differ from those when the calibration was started with O . The difference in phase relations corresponds to changes which would be brought about by a Lorentz transformation which transforms A to rest.

4. Although the calibration of the system K_0 by light signals is perfectly feasible (it is indeed simply an application of radar methods), there is an alternative way open for this calibration which, assuming the expression for time contraction as starting point, is of greater practical importance than the radar method.

We consider at the origin O two clocks of similar construction which are perfectly synchronized. If we move one of the clocks along the x axis, the clock slows down its rate by the factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$, if the clock travels a distance a along the x -axis then it will lose time at a rate $1 - \sqrt{1 - v^2/c^2}$ on its journey, and arriving at the end of its journey it will have suffered total loss of

$$\Delta T = \frac{a}{v} (1 - \sqrt{1 - v^2/c^2}).$$

Developing the latter expression in powers of v we find

$$\Delta T = av/2c^2 + \dots,$$

thus in the limit $v \rightarrow 0$ we have $\Delta T \rightarrow 0$. Thus if we move the clock sufficiently slowly then the disturbance to the clock can be kept arbitrarily small. We can therefore transport clocks very carefully into all parts of K_0 , and these clocks will remain in step. Furthermore the coordinates of the points where the clocks have been transported to can be calculated from the times of transports.

The fact that clocks, moved slowly enough, remain in step with each other, is of great practical importance. A clock in the sense of relativity is any closed material system. We see therefore that we can move about such systems in our system of reference K_0 without disturbing phase relations, provided the

transport is sufficiently slow. This result is made use of in many actual experiments.

§ 6. *Construction of a system K_1 .* We suppose that the system K_0 has been mapped out, that clocks in K_0 have been calibrated and that the system has proved in good approximation to be Euclidean in the four dimensional sense. We deal in the following with the question of how to obtain a system K_1 which is in uniform motion with respect to K_0 .

1. Consider a large number of fixed points in K_0 . For the sake of an example suppose a cubic lattice of fixed points with a lattice constant a , the sides of the cubes parallel to the directions of the coordinate axis. Let us place near each of the fixed lattice points a mass point. At a *pre-arranged* time t we switch on a force on each one of the mass points. The forces shall act in a pre-arranged manner for exactly equal periods and afterwards cease. The forces thus accelerate each of the mass points in the same way and leave them moving finally with velocities v in the direction of the positive x -axis.

The points thus set into motion will form a moving lattice which is an exact replica of K_0 . This lattice is such as if K_0 had been accelerated as a whole, without suffering any Lorentz contraction. We may regard this moving lattice formed out of the moving mass points as a moving system of coordinates of K_1 .

So as to answer the question »whether it is possible« to accelerate mass points in the way described above, I suggest the following one-dimensional picture as an illustration.

Imagine a road, and imagine motor-cars parked along it at distances a . The drivers have orders to start the cars at a pre-arranged instant, to accelerate in a pre-arranged manner, and to stop accelerating once the cars have reached a velocity v . These cars exactly represent the system of mass points. The cars themselves suffer of course Lorentz contractions in their length directions — but not the distances between the cars. Indeed, suppose the n^{th} car before starting has its x coordinate given by $x_n(0) = na$. The acceleration of any one of the cars takes the same time, as the accelerations are to be carried out in identical manner. Thus we can assume that each of the cars completes the process of acceleration during a time t_0 (measured in K_0) and during this time t_0 each car proceeds the same distance a_0 . Thus, at a time t_0 the coordinate of the n car will be $x_n(t_0) = na + a_0$. After t_0 the cars proceed with uniform velocity v (v is again measured from K_0), thus we have for any time $t > t_0$ in K_0

$$x_n(t) = na + a_0 + v(t - t_0),$$

and thus the distance between two subsequent cars is simply

$$x_{n+1}(t) - x_n(t) = a.$$

As everything is referred to K_0 this consideration is quite straightforward and no questions of transformation properties appear. In fact, at the present

stage of our consideration we have not yet introduced any complete system of reference except K_0 , thus we could not yet refer data to any other system.

We note that if the cars are connected by elastic bands, too weak to influence their motion then these bands would try to contract as the effect of acceleration and as the contraction would be prevented from taking place by the motion of the cars a certain stress would develop in these bands.

2. *Transfer of time measurement.* In the previous section we have discussed a way to construct a system of points of a coordinate system K_1 which moves uniformly as compared with the original system K_0 . To make K_1 a complete system of reference we have to establish a method of time measurement in K_1 . There are two simple ways to do this.

Firstly, we can have clocks situated near every one of the mass points in K_1 and adjust these clocks in such a way that whenever they pass one of the

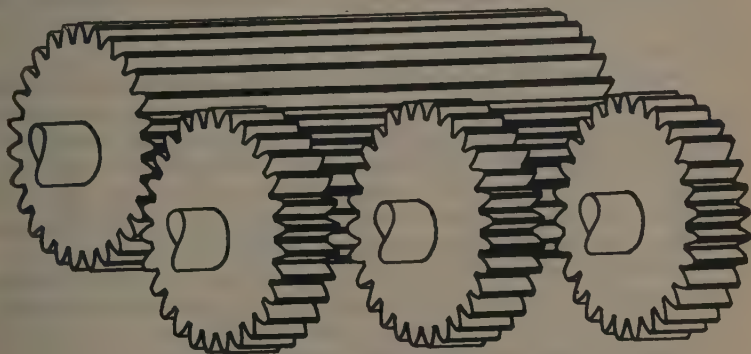


Fig. 1.

clocks in K_0 they are made to agree with this clock in K_0 . This method of adjustment completely agrees with the method discussed in § 5/3, where it was shown that clocks may be adjusted by means of light signals emitted from a standard clock situated at the origin O of K_0 .

Secondly, the same result can also be achieved in a more direct way, as follows¹:

Imagine a long cylindrical cogwheel (see fig. 1) rotating uniformly with its axis parallel to the x axis of K_0 . This cogwheel can be regarded as a clock in K_0 . Suppose further small cogwheels to be attached to the points which are to be accelerated. Let us suppose that during the period of acceleration of the mass points the small cogwheels are sliding along the long cogwheel,

¹ I am indebted to Ernő Ács for a suggestion which led to the consideration below.

remaining in contact with it and being driven by it. After the process of acceleration has been accomplished the small cogwheels can be detached from the long cogwheel by a small sideways displacement and thus they rotate freely by inertia. These freely rotating cogwheels can now be regarded as the clocks in K_1 .

For the sake of completeness we note that during the process of acceleration the long cogwheel has to transfer a certain amount of energy to the small cogwheels because it has to prevent their relativistic slowing down. We can assume that the masses of the small cogwheels are negligibly small as compared with that of the long cogwheel, and thus we can neglect the reactions of the small cogwheels on the long one. However, we can eliminate the reaction of the small cogwheels using the following arrangement. We start our experiment with two long cylindrical cogwheels where the one is used to drive the small cogwheels, while the other is used as a pilot. Now we may, if necessary, apply forces to the loaded cogwheel so as to force it to remain in step with the unloaded one.

We have thus described a method of constructing a system K_1 consisting of mass points and cogwheel clocks, which has been built by accelerating a replica of K_0 in a completely uniform manner. *The system K_1 corresponds to the Galilei transform of K_0 , but on account of the very symmetric way in which K_1 is obtained we can regard K_1 as a natural transformation of K_0 . The features of the Lorentz transformations have been suppressed in the process of construction of K_1 by eliminating and suppressing the action of material forces.*

§ 7. We have shown in the previous paragraph how to construct physically a system of reference K_1 which is a perfect Galilei transform of the system K_0 . The system K_1 is an inconvenient system of reference, because we find 1. that the propagation of light is not isotropic relative to K_1 , 2. that clocks moved about very slowly in K_1 , even in the limit of zero velocity, suffer phase shifts.

We show first that both of these inconvenient properties of K_1 really exist.

1. That light is propagated isotropically in K_0 can be demonstrated by the Michelson-Morley experiment. Let us consider an interferometer in K_0 consisting of four unconnected parts (see fig. 2) i. e. a half-silvered plate P and two mirrors M_1 and M_2 and a telescope T . If we turn the system round so that the relative positions of M_1 , M_2 , P and T do not change, then the system of fringes seen in T will not change. When we accelerate the system so that we accelerate separately but simultaneously the four parts, then we transfer the interferometer into K_1 . Such an acceleration is bound to affect the fringe system seen in T . In fact this acceleration of the interferometer would give a phase shift expressed in time equal to

$$\Delta T = l \left(\frac{4}{c} - \frac{2}{\sqrt{c^2 - v^2}} - \frac{1}{c-v} - \frac{1}{c+v} \right) = -\frac{lv^2}{c^3} + \dots \quad (13)$$

The above expression is precisely that which Michelson and Morley expected

to but did not find in their experiment. The difference between the experiment discussed here and the Michelson-Morley experiment is, that the actual Michelson-Morley interferometer did not consist of unconnected parts — but was a rigid system. If the parts of our supposed interferometer were connected by material rods, then the parts would be displaced after acceleration by the elastic forces arising in the rods. Thus, if we leave free play to the elastic forces, then they will distort the interferometer with respect to K_1 and thus compensate the phase shift given in (13).

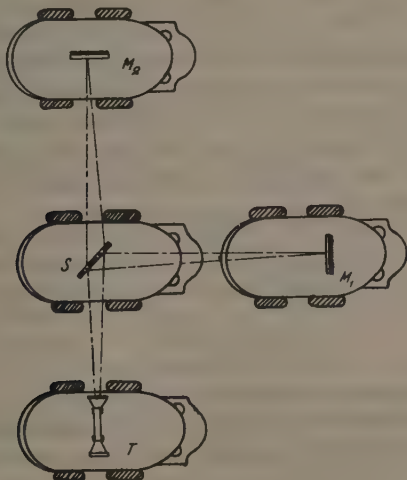


Fig. 2.

To make this idea quite clear, we suppose that in a schematic way the four parts of the interferometer are mounted to four cars. These cars should start in the manner described in § 6/1 (we suppose that the cars move smoothly enough so as not to spoil the interference fringes). The interferometer thus put into motion will certainly show a phase shift. We have mentioned in § 6/1 that elastic bands between the cars become stressed when the cars start moving, because these bands try to contract but are prevented from it by the cars. If now eventually we let the cars approach each other to such an extent, that the elastic stresses brought about by their motion cease, then we displace the mirrors in an exactly suitable way so as to compensate the phase shift.

Summarizing, we see, that the propagation of light in K_1 is not isotropic; of course, this result supposes that we accept the method of constructing K_1 as proposed in § 6.

2. Another inconvenience of K_1 is that a clock moved with an arbitrarily

small velocity w along the x axis of K_1 will suffer a phase shift even in the limiting case of $w \rightarrow 0$. Indeed, a clock accelerated so as to move not with a velocity v but with a velocity $v + w$ is slowed down as an effect of the increment w by a factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}/\sqrt{1 - (v + w)^2/c^2}$, thus we find for the phase shift along a distance a

$$\Delta T = -\frac{a}{w} \left(1 - \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2}}{\sqrt{1 - (v + w)^2/c^2}} \right) = \frac{av}{c^2 - v^2} + \text{terms in } w.$$

Thus,

$$\lim_{w \rightarrow 0} \Delta T = -\frac{av}{c^2 - v^2}, \quad w \text{ parallel to } v, \quad (14)$$

and thus the clock will lose time on its journey, however slowly it is moved with respect to K_1 . We note that the above expression agrees precisely with (7), the phase shift appearing in the Lorentz transformation.

If we travel not along the x -axis but along the y axis, then we have a change of velocity from v to $\sqrt{v^2 + w^2}$, and we find that in the limit $w \rightarrow 0$ no phase shift remains.

To avoid the inconvenience described above we may apply deliberately phase shifts to all clocks in K_1 . We thus construct a new system of reference, which we denote K'_1 ; the latter arises from K_1 by shifting the phase of each clock by

$$\Delta T = -\frac{xv}{c^2 - v^2},$$

where x is the x -coordinate of the clock in K_1 .

This adjusting of clocks changes the values obtained for the velocity of light. In K_1 a signal travelling along the x -axis takes a time

$$t_1 = \frac{a}{c - v} \text{ respectively } t_2 = \frac{a}{c + v}$$

to travel from O to A and back from A to O ($\overline{AO} = a$). In the new system of reference K'_1 we have when noting the time of arrival of the signal from O to A to subtract from the actual time of travel the time by which our clock has been put back, similarly we have to add this time to the time of travel when the signal goes back from A to O . Thus, with the clocks in K'_1 with which we have tampered the times of the two journeys appear to be

$$t'_1 = \frac{a}{c - v} - \frac{av}{c^2 - v^2} \text{ respectively } t'_2 = \frac{a}{c + v} + \frac{av}{c^2 - v^2}.$$

Thus

$$t'_1 = t'_2 = \frac{ac}{c^2 - v^2}$$

and therefore the velocities of light in the positive and negative x -directions are equal, namely

$$|c'_{+x}| = |c'_{-x}| = a/t'_1 = a/t'_2 = c(1 - v^2/c^2).$$

The apparent velocity of light along the y -axis has not been changed by the adjustment, thus we have with respect to the clocks in K_1'

$$c_y' = \sqrt{c^2 - v^2}.$$

In the adjusted system K_1' there is still a discrepancy between the measured velocities of light in the x and y directions. This discrepancy can be eliminated by changing the units of length in the x or y directions (or in both) in a suitable manner. For instance we may reduce the unit of length in the x -direction by a factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$. The system thus obtained might be denoted K_1'' . In K_1'' the propagation of light appears isotropic and clocks moved about slowly remain in phase with the local time. The velocity of light in K_1'' is

$$c_x'' = c_y'' = \sqrt{c^2 - v^2}.$$

Although K_1'' is already a suitable system of reference it can still be somewhat improved if we slow down all the clocks in K_1'' at the ratio $1:\sqrt{1 - v^2/c^2}$. If we do this, we get a system K_1^* in which the velocity of light appears as

$$c^* = c''/\sqrt{1 - v^2/c^2} = c.$$

Thus the velocity of light in K_1^* is the same as in K_0 and as a result of the series of adjustments leading from K_1 to K_1' to K_1'' and finally to K_1^* we have obtained a system in which we have compensated all the effects of motion by suitable adjustments of coordinates and clocks. Indeed, K_1^* is the exact Lorentz transformation of K_0 ; any closed material system at rest in K_0 will suffer changes when accelerated so as to move with a velocity v along the x axis. These changes will be apparent when the material system is measured from K_1 , the changes, however, are not apparent when the material system is measured from K_1^* . Thus the K_1^* system already compensates for changes which have been caused by the acceleration. In the present view the system K_1^* is one where clocks and lengths have been deliberately tampered with. This tampering brings about the advantage that it corrects measurements so as to eliminate the effects of the translational motion. As these effects are for most purposes thoroughly uninteresting, they represent a burden only, therefore it is a real advantage to have a system K_1^* which is freed of these effects.

III. Dynamics of the Galilei and Lorentz transformation

§ 8. We see thus that a materially unconnected system like the mass points in the first or the cars in the second example show no Lorentz contraction if accelerated in a suitable way. A connected piece of matter behaves differently as can be seen in the following example.

1. Consider a rigid rod parallel to the x -axis of K_0 . (See fig. 3.) We accelerate this rod uniformly in the following way: We switch on at a large number of points of the rod suitable forces. So as to choose the forces suitably, we place a large number of mass points near the rod and apply equal forces on these mass points just in the way we have proposed in § 6/1; the mass points will thus be accelerated and move as a rigid system. We consider now the mass points as pilot particles and apply such forces to the rod itself that each part of the rod is being made to move exactly in step with the nearest pilot particle.

Once the pilot particles have been accelerated and have reached the velocity v the forces on the pilot particles cease suddenly. Because of our prescription the forces on the rod do not cease entirely, since owing to acceleration elastic forces have arisen in the rod which try to bring the Lorentz contraction about. Thus certain forces have to remain which counterbalance these elastic forces and keep the rod in a state of stress. If we switch these forces off slowly

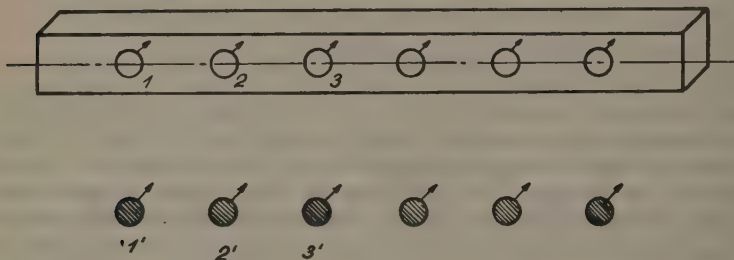


Fig. 3.

then the rod will contract, equilibrium being achieved after the rod contracted at the ratio $1:\sqrt{1-v^2/c^2}$. Instead of the rod we can consider a network of rods connecting the system K_0 together. We can thus construct say a cubical lattice in K_0 , the lattice points connected with material rods. We can now accelerate the whole lattice by help of forces switched on simultaneously. So as to avoid distortion, we can place a pilot particle near each of the lattice points and continuously adjust the forces acting on the lattice points so as to keep them in step with the pilots which in their turns are accelerated by constant forces.

Once the acceleration is accomplished, the lattice points form a cubic lattice which is at rest in K_1 . But owing to the acceleration the connecting rods will become stressed. The stress can be relieved by allowing the lattice to contract in the direction of the velocity at the ratio $1:\sqrt{1-v^2/c^2}$. Thus the materially connected lattice shows a certain tendency automatically to produce the Lorentz contraction.

When releasing the stressed system, the contraction will take place in a different manner according to the way the forces are released. We may e. g. switch off the forces suddenly at an instant t . Thus, the forces are switched off simultaneously according to the clocks of K_0 or of K_1 . The elastic forces will, with a finite speed, start to produce the Lorentz deformation. They will not change the total momentum of the system — thus the contraction will take place towards the centre of gravity, which not being shifted is a fixed point of the deformation. If O was the centre of gravity of K_0 then the particle O' which started its journey from O will be the centre of gravity of K_1 and the contraction will be symmetric with respect to O' . However, if either the release of the accelerating forces or the distribution of masses in K_0 is different from what we have assumed here, then the contraction may centre round any other point of K_1 . Thus, the question as to which is the fixed point of the coordinate transformation cannot be answered without knowing in detail the method of constructing K_1 . Thus, in the transformation formula connecting K_0 and K_1 we have to write

$$x^* = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \alpha,$$

where x^* is the coordinate of the very same point which started its journey at a distance x from the origin of K_0 . The usual normalization $\alpha = 0$ restricts the methods of obtaining K_1 to those where we have processes completely symmetric around the particle starting in O .

2. We have to investigate, how far the Lorentz phase shift between clocks comes about automatically, if we accelerate a materially connected system. First of all, let us consider wheels rotating round an axis parallel to the x axis. The wheels should be fastened in such a way that they cannot slip along the axis, but at the same time rotate freely around the axis with negligible friction.

If we accelerate the axis parallel to its own direction, then it behaves exactly like the rod discussed further above. Suppose we accelerate it, at the beginning using suitable forces which prevent the Lorentz contraction to take place. As an effect of the acceleration the wheels will diminish their angular velocities by a factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ but no phase shift between the wheels will arise. If we now release the axis and let it contract slowly, then the wheels can be regarded as slowly transported clocks and according to equ. (14) § 7/2, they suffer phase shifts proportional to their displacements. If the clock was placed originally at a distance x from O then it will suffer a displacement

$$\Delta x = x(\sqrt{1 - v^2/c^2} - 1),$$

and a phase shift

$$\Delta t' = - \frac{x(\sqrt{1 - v^2/c^2} - 1)v}{c^2 - v^2}$$

will arise. The latter shift is opposite in sign to the Lorentz shift and of much smaller order than the Lorentz shift, provided $v \ll c$. Thus, the connection of the wheels is not sufficient to produce automatically the Lorentz shift.

A more suitable connection between the wheel clocks can be introduced by fastening a plate to the circumferences of the two clocks, as shown in fig. 4; the plate is supposed to be sufficiently rigid to keep the clocks in step.

If we now accelerate the system consisting of the two wheels connected with the plates, we find that the connecting plate distorts in such a way as to shift the relative phase of the clocks in accordance with the Lorentz phase shift.

Indeed, suppose the wheels rotate with an angular velocity ω and have radii ρ then their circumferences move with a velocity

$$w = \rho\omega$$

perpendicular to the direction of v . The rectangular plate connecting the wheels is thus made to move in a direction $\vec{v} + \vec{w}$, skew to the sides. Thus the Lorentz

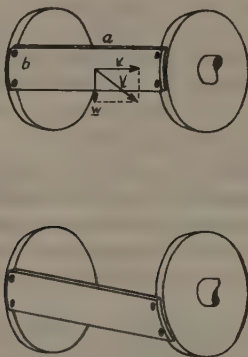


Fig. 4.

contraction deforms the rectangular piece to a parallelogram and thus it shifts the phases of the wheels with respect to each other. (Calculation see appendix.)

Instead of wheels connected by simple connecting plates, we can consider a rigid cylinder rotating freely around an axis parallel to the x -axis.

The lines of constant velocity on the surface of the cylinder are spirals round the cylinder; the contraction along these spirals causes the cylinder to twist and thus, if before accelerating we draw straight lines on the surface of the cylinder parallel to the axis, then these lines twist into spirals as an effect of the Lorentz deformation. The deformed cylinder can be regarded as an

extended clock, each part of it in step with the clocks in K_1^* . Thus, the cylinder representing a connected material system deforms as an effect of acceleration in such a way that the deformations exactly disappear if the system of coordinates is changed from K_1 to K_1^* .

Thus if we were to accept K_1^* as the proper transform of K_0 , then we would come to conclude that after acceleration the system settles down eventually into an undeformed state. It seems, however, much more straightforward to say that the system is in fact deformed when accelerated and that the system K_1^* is suitably adjusted so as to compensate for these actual deformations.

3. Comparison of the Galilei and Lorentz transformations. To obtain the Galilei transform of K_0 we have to switch on forces uniformly distributed over the whole system. These forces will lead directly to a rearrangement from K_0 to K_1 . The forces can be large and lead to a quick transition. If the forces are switched off suddenly at an arbitrary instant, they will leave the system always in a Galilei transformed state without any need for relaxation. Further, it is immaterial how large or small the acceleration is which is used to transform. The system to be transformed can be arbitrarily large, provided sufficient time of preparation is granted. This time is needed to settle the instant where the accelerations are to set in simultaneously in distant points. If the decision to start the acceleration of a system of length L at a time t is made at one end of the system, then with help of light signals the co-workers at the other end of the system have to be informed to start the acceleration at this time; the message needs a time L/c if it is sent by means of light signals.

The state of affairs is much the same if a material system is accelerated, provided provision is made for the application of forces to compensate the elastic stresses.

In contrast to the straightforward transition between Galilei transformed systems the direct transition between a system and its Lorentz transform is a complicated process, depending largely on the material properties of the system involved, as we show presently; if the transition process from K_0 to K_1^* is suddenly stopped, before being complete then the system is usually not left in a Lorentz state, at best a relaxation is needed before the momentary state settles down to a Lorentz transformed state.

From this we conclude that the Galilei transform is the really fundamental form of transformation, while the Lorentz transformation is a corrected Galilei transform; the corrections on the coordinates which appear in the Lorentz transformation being such that they exactly compensate (reversible) deformations in a material system brought about by acceleration. The compensation is, however, only complete once the system has completely relaxed into its accelerated state.

4. Direct transition between Lorentz systems of an unconnected system. We thus proceed with the detailed discussion of how systems behave in the process of

acceleration. We consider a direct transition of the points and point clocks of a system K_0 into a system K_1^* .

Applying suitable forces on the points and suitable torques on the clocks, we can compel the system to go through any desired change.

We thus consider a cubic lattice of unconnected mass points in K_0 together with synchronized but independent clocks near each of the lattice points. We may now require that in an interval between $t = 0$ and $t = t_1$ the system is to be rearranged into K_1^* . Thus, the points should be accelerated and the clocks slowed down so that the whole system of points and clocks is arranged to its Lorentz transformed state. This rearrangement can take place continuously through a chain of intermediate arrangements, there being a continuous manifold of suitable chains. In general these transitions will be such that in the course of re-arrangement the system does not correspond to Lorentz transforms of the original arrangement. We investigate now, how far it is possible to go through a continuous chain of Lorentz transforms of the original state and eventually to arrive at K_1^* . To investigate how far such a transition is possible it is convenient to single out two points and follow up their motion. Consider thus a point clock M_0 starting its journey at $x = 0$ and another point clock M_a starting from $x = a$. We accelerate M_0 so that its velocity at a time t becomes $v(t)$ with

$$v(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ v & t > t_1, \end{cases}$$

the x coordinate of M_0 will thus be

$$x_0(t) = \int_0^t v(t) dt.$$

If we require, as is usually done, that

$$x_0(t) = vt \text{ for } t > t_1,$$

i. e. if, we require that M_0 should become the origin of K_1^* , then for a certain part of the interval $0 < t < t_1$ $v(t)$ must exceed v . Thus a certain overshooting of the final value is needed so as to bring M_0 into the origin of K_1^* .

On account of the Lorentz contraction M_a has to move so as to approach steadily M_0 ; the x -coordinate of M_a thus must be made to be

$$x_a(t) = \int_0^t v(t) dt + a\sqrt{1 - v(t)^2/c^2}.$$

The velocity of $x_a(t)$ is

$$V_a(t) = \frac{dx_a(t)}{dt} = v(t) + a \frac{d}{dt} (\sqrt{1 - v(t)^2/c^2}).$$

Thus, in general

$$V_a(t) \neq v(t).$$

In particular we note that for sufficiently large a the correction may become so large that $V_a(t)$ may exceed the velocity of light. The rates of motion of the clocks M_0 and M_a have also to be controlled steadily, so that their readings at a time t should be given by

$$t_0(t) = t \sqrt{1 - v(t)^2/c^2}, \quad (M_0)$$

and

$$t_a(t) = \sqrt{1 - v(t)^2/c^2} \left(t - \frac{av(t)}{c^2 - v(t)^2} \right). \quad (M_a)$$

Differentiating the above expressions into t , we see that

$$\begin{aligned} \frac{dt_0(t)}{dt} &= \sqrt{1 - v(t)^2/c^2} + t \frac{d}{dt} \sqrt{1 - v(t)^2/c^2} \\ \frac{dt_a(t)}{dt} &= \sqrt{1 - v(t)^2/c^2} + t \frac{d}{dt} \sqrt{1 - v(t)^2/c^2} - a \frac{d}{dt} \frac{v(t)}{\sqrt{1 - v(t)^2/c^2}}. \end{aligned}$$

Both rates differ from $\sqrt{1 - v(t)^2/c^2}$ the rate of a clock in a stationary system. Thus, we may lead our system through configurations which at any instant show positions of lattice points and clock readings in accordance with a Lorentz system but the rates of movements in our changing system necessarily differ from those in a Lorentz system; for sufficiently large values of a the rate $dt_a(t)/dt$ even becomes negative thus the clock at large distances from the centre has to be made to go backwards on its time scale. Thus, if we were to switch off all the driving forces at an instant $t' < t_A$, the points and clocks would at that instant be in positions and show readings corresponding to a Lorentz transformation of K_0 , but this adjustment would not remain so adjusted owing to its own inertia. Once acceleration has come to an end the particles will proceed with the velocities they had at the instant of the cessation of the forces. In this way M_a will have a velocity component towards M_0 and the clocks M_a and M_0 will also proceed at different rates, neither of them with the rate $\sqrt{1 - v(t')^2/c^2}$, corresponding to a Lorentz system of velocity $v(t')$.

Thus, it is impossible to change steadily from K_0 to K_1^* passing through strict »Lorentz systems« only.

Considering a material system the process of accelerating has most complicated features. The details of the transition process depend essentially on the manner of acceleration and also on the elastic properties of the accelerated system. To begin with, care must be taken that neither the applied forces nor the arising elastic stresses should exceed certain limits because too large forces will cause permanent deformations. If such large forces are applied to a system

then it will settle down into such a final state where its deformation is apparent even from K_1^* .

5. *Stationary acceleration.* Carefully applying only sufficiently weak forces we can consider the following procedure. We accelerate all parts of the system by separately applied forces to a small velocity Δv . After the acceleration we wait until the system relaxes from the elastic stress brought about (i. e. we wait for the contraction $1/\sqrt{1 - (\Delta v)^2/c^2}$ and in case of a rotating system also for a certain twist to take place). Once the system has relaxed, we can apply the same increment of acceleration and thus accelerate up to a velocity $2\Delta v$ and wait again for relaxation. Thus, step by step we reach the final state with velocity v , the smaller the individual steps the smaller the temporary deviation of the system from its actual state of equilibrium. We can of course smooth out the process of acceleration and we may arrive at a process in which the system is steadily accelerated and all the time it lags behind its state of equilibrium. This lag can be reduced below any given limit by reducing the average value of acceleration.

We can thus accelerate a material system so that its momentary shape is to any desired accuracy the Lorentz transformation of the initial shape.

The order of magnitude of the acceleration which can be allowed to act on a system without preventing its steady relaxation depends entirely on the elastic properties and on the size of the system. In the case of acceleration by sudden increments, the times which have to be allowed for the system to relax are at least of the order of the time an elastic wave requires to traverse the system; the relaxation time can, however, be much longer if the frequencies of the elastic vibrations of the system are low.

Accelerating a material system in such a stationary way as we have just considered, we find that the momentary shape of the system moves through a continuous set of Lorentz transformations — but that the rates of motion of the individual parts of the system consist of two components: 1. the actual Lorentz transformed motion, and 2. the rate of change through the steady change of Lorentz systems.

Thus, if we consider rates of changes (like the rates of clocks), then we find that the system does not really settle down into a Lorentz system until the acceleration has been fully accomplished.

Just as in the case of the unconnected system, if the acceleration is suddenly switched off, then owing to the motions of the parts of the system, the system will overshoot, only as the result of oscillation or damped relaxation will it eventually settle down into the Lorentz transformed configuration.

The overshooting can, of course, be avoided if the forces are switched off gradually instead of suddenly.

Instead of accelerating a system slowly so that the elastic forces can keep in step, we can accelerate the system suddenly, so that the elastic forces have

no time to come into play during the process of acceleration. In this latter case the accelerated system does at first not deform but a perfect Galilei transform is brought about, and only afterwards under the influence of elastic forces starts the system to deform (possibly it starts to oscillate mechanically) until it settles down in conformity with K_1^* .

6. The behaviour of a clock system under acceleration seems to us to demonstrate very clearly the essential physical features of the Lorentz transformation which can be summarized as follows.

A mechanical system which is at rest and in equilibrium in K_0 is not in equilibrium any more once it is set into motion. The new equilibrium has to be obtained by the action of the inner elastic forces released by the change of state in the course of acceleration of the system. The acceleration brings about an inner change of state and it is up to the elastic forces to secure the new equilibrium corresponding to the new physical state.

The change of state brought about by acceleration can be compared with the change of state caused by change of temperature of a mechanical system. Heating a material system gradually, the system will expand; the expansion can be understood as establishing equilibrium in the changed inner state.

The role of the elastic forces becomes quite clear if we consider a very sudden rise of the temperature of a large elastic body. If this rise is accomplished in a short time and uniformly throughout the whole body, then owing to the inertia of the body the rise of temperature merely produces a rise of inner pressure; but this pressure is built up so quickly that during the time it builds up it has no time to establish equilibrium. Thus, only after the temperature rise has already been accomplished the pressure will gradually overcome the inertia of the system and cause deformations until equilibrium is established between heat motion and elastic forces at the higher state of temperature.

Thus we can »throw« a system into a state of higher temperature and we expect that the deformation of the system takes place lagging behind the actual rise of temperature — the lagging behind depending entirely on the mechanical properties of the system.

Just in the same way, we can »throw« a system into a state of translation by a sudden application of uniformly spread out forces. The translational state can thus be attained without deformation, the Lorentz deformation builds up only as an effect of the new state of inner forces. Just as in the case of heating, the deformation of the system will lag behind the change of state. (The state itself is characterized by the velocity relative to K_0). The amount of lagging is entirely determined by the mechanical properties of the system.

This analogy underlines the interpretation of the Lorentz deformations as deformations caused by the change of the state of inner equilibrium, caused by the change of inner state of the system.

IV. The mechanism of the Lorentz deformation

§ 9. We have shown in the previous section that in a material system which is brought into translational motion certain changes of state take place. These changes of state, somewhat similar to those of change of temperature, destroy the equilibrium of the inner forces and thus, the change of state is followed rapidly by a deformation which eventually brings about again the equilibrium. The mechanism of this change of state can be understood without difficulty.

The Lorentz deformations are caused by the finite velocity of propagation of the acting forces.

All the elastic forces inside a system can be derived from the inter-atomic forces and these are essentially quantized electromagnetic forces. Thus eventually the forces acting in a system are composed of electromagnetic forces which are propagated with the velocity of light.

The precise mode how the finite propagation of electromagnetic action causes the Lorentz deformations is demonstrated in a particular case by the well-known derivation of the field of a moving electric charge from the retarded potentials (without explicit use of Lorentz transformation). The retarded potentials are :

$$\Phi = \int \left[\frac{e}{r} \right] dV, \quad A = \int \left[\frac{ev}{r} \right] dV,$$

where the integration is to be extended over the charge distribution inside the particle, and the square bracket signifies that charge etc, have to be taken at retarded times. After the calculation is carried out for an extended distribution one has to proceed to the limit of zero extension of the charge distribution, and can thus calculate the field of a moving point charge. The detailed calculation¹ shows that the field of a point charge moving free of acceleration thus obtained is exactly the field one obtains as the Lorentz transform of the Coulomb field of a static charge. In particular, the field thus calculated is contracted in the direction of motion by a factor $\sqrt{1-v^2/c^2}$. Thus the calculation taking into account the finite speed of propagation of an electromagnetic field gives exactly the Lorentz transformed field without any reference to Lorentz transformation or theory of relativity. Thus, the Lorentz deformation of the static field of a charge can be fully accounted for in terms of the retardation — i. e. in terms of the finite speed of propagation of the electromagnetic field.

Instead of a simple charge we may consider a more complicated system consisting of particles which act upon each other, the actions propagated with the velocity of light.

¹ See e. g. *W. Heitler, Quantumtheory of Radiation*, 2nd ed., Oxford 1949, pp. 19—22.

If we accelerate this system without deformation, then we disturb the equilibrium between the forces. The actions upon a point A of the system, coming from the points $B, C \dots$ etc, come from retarded positions and thus, the relations between the various parts of the system are upset by the acceleration. If we rearrange the system in accordance with a Lorentz transformation, then we eliminate all the asymmetries arising from the motion of the parts of the system and thus we get an equilibrium arrangement.

Let us consider as an example of such a system a hydrogen molecule. The distance between the protons inside the molecule can be calculated by calculating the energy of the system as function of the distance of the protons. The distance for which the energy is a minimum is the equilibrium distance.

A similar calculation, though much more complicated, could be carried out for two protons in motion. The fields of the moving protons and of the two electrons have to be taken as the retarded fields, the energy has to be minimized and thus the equilibrium distances calculated. Without carrying out this calculation, we can predict with certainty what the result of such a complicated calculation would be. Since quantum mechanics is consistent with relativity, the problem can be dealt with as follows. We transform the system to rest by a Lorentz transformation, regard, however, this transformation merely as a mathematical trick, namely as a change of variables. The calculation can thus be carried out with help of these new variables and in the end we return to the old variables by means of the reversed Lorentz transform. The Lorentz transformation in this consideration may be looked upon as a purely mathematical tool which helps to simplify the mathematically difficult problem of treating the moving protons. The result of this calculation obviously shows that the moving hydrogen molecule is contracted in the direction of motion by a factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$. This contraction is, however, to be regarded as the effect of retardation on the equilibrium distribution.

It can be thus concluded, that the inner change of state, which we discussed at the end of the previous paragraph, and which is responsible for the Lorentz deformations, is due to the retardations suffered by inter-atomic forces in a moving system.

§ 10. Although it seems to be clear that in a material system the atomic forces produce the Lorentz deformation through their finite speed of propagation, it seems useful to discuss a schematic model of a crystal lattice in order to illuminate details.

Consider the following, completely schematic picture, of an one-dimensional lattice. Suppose the lattice points 1, 2, 3, etc to be arranged at equal distances a from each other. Suppose further that each lattice point periodically emits light impulses at intervals t . We suppose now that these impulses represent the inner forces in such a way that the energy of the lattice is a minimum provided impulses coming from the various lattice points meet simultaneously

and in lattice points. Thus if the impulses are emitted simultaneously by all lattice points at $t = 0, a/c, 2a/c, \dots$ etc, then the energy is minimized.

If we deform the lattice, e. g. compress it, then we disturb the phase relations, the signals will in the deformed state not meet simultaneously at the lattice points but the times of meetings will be spread over a small time interval and the meetings will take place in the vicinity of the lattice points. Thus according to our assumptions by compression of the lattice we increase its energy. From this increase of energy we can derive the elasticity modul of the lattice.

If our lattice is set into motion parallel to its own direction by accelerating simultaneously each lattice point individually, then the phases of the impulses are upset just as they were upset in the case of compression. If we assume that the rates of the emission of impulses decrease by the factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ as the effect of acceleration (slowing down effect of clocks) we find, that the energy of the moving lattice is minimized provided 1. the lattice constant is reduced to $a \sqrt{1 - v^2/c^2}$, 2. the phases of emission of the impulses are shifted by the Lorentz shift, i. e. so that the shift of the phases of two consecutive lattice points becomes $\Delta t = - \frac{av}{c^2 - v^2}$.

If on the other hand the lattice is set in motion perpendicular to its own direction, then the lengthening of the path of the impulses in the moving lstate of the lattice is exactly compensated by the slower motion of clocks, and thus the equilibrium is not disturbed by the perpendicular motion. An acceleration into a direction at some angle to the lattice direction can be discussed similarly.

The above picture shows in a rather primitive way the connection between propagation of inner forces and Lorentz deformation. We note the following feature of the present model.

Suppose an interferometer to be constructed out of two rods OA and OB standing at right angles to each other. Their length should be equal $OA = OB = na$, thus they each should consist of n links of a lattice chain. A light signal sent from O to A and reflected back to O requires a time $2na/c$, the same time is required by a signal to travel along OB and back. If two such light signals start in step with impulses travelling between the lattice points, then they will also return in step with them and they will always travel exactly in step with such impulses. If we set the whole system in motion, then it will adjust itself so that impulses coming from different parts will meet exactly at the lattice points. Thus, if the light signals start their journeys $O-A-O$ and $O-B-O$ in the accelerated but completely relaxed system then they are bound to travel again together with the impulses and, as the system has adjusted itself so as to let impulses meet at lattice points, the light signals travelling in step with

impulses will also meet at O . Thus the deformation of the lattice exactly compensates the differences of velocity of light in the OA and OB direction.

This experiment can also be interpreted by saying that measuring the light velocity in the directions OA and OB , we do in fact nothing else but compare the velocity of outer light signals in these directions with the velocity of propagation of the inner impulses in the same direction — the result merely shows that in an equilibrium state the outer light signal travels exactly with the same velocity as an inner impulse of the same direction. Viewed in this way, the Michelson-Morley result becomes to some extent trivial.

§ 11. From the discussion of the previous paragraph, we see that a material system, kept together by forces which are isotropically propagated in K_0 with a velocity c , will suffer a Lorentz deformation if it is brought into translatory motion with respect to K_0 . Reversing the argument it seems likely that if a system shows the Lorentz deformations then the inner forces of this system are in fact propagated isotropically and with velocity of light.

If for the sake of argument, we assume some action propagated with velocity $C > c$, then a system kept together by such hypothetical kind of force would also show a kind of Lorentz deformation, but in all expressions relating to this peculiar kind of matter c had to be replaced by C . The length contraction e. g. would be $\sqrt{1 - v^2/C^2}$ instead of $\sqrt{1 - v^2/c^2}$.

It is often asserted, that if a physical action propagated with a velocity $C > c$ was found, then the theory of relativity would be invalidated. According to our considerations this is not at all the case. The role of the velocity c , according to the views expressed in this article, is simply that it represents the velocity of propagation of the forces keeping ordinary matter together. If a piece of matter is moving with a velocity $v < c$, then it has to adjust itself to the inner asymmetry caused by the anisotropic propagation of action with respect to the system. This adjustment takes place by such a deformation (i. e. the Lorentz deformation) that the anisotropy becomes effectively compensated.

These deformations take place not only in material systems consisting of many elementary particles, but also somehow in the inner structure of elementary particles themselves, as the latter behave also in a Lorentz-invariant way.

If the parts of a system were to move with a velocity exceeding that of light, then no deformation could possibly compensate the asymmetries arising. In the latter case impulses sent out by parts of the system would be propagated in one direction only and thus equilibrium could not be established.

The energy of a system whose equilibrium is so thoroughly upset can be supposed to be very large. Thus according to this assumption it might not be absolutely impossible for a system to move with over-light velocity, but the energy of such a system would be very large, if not in fact infinite. At any rate we have a qualitative difference between under-light velocities and over-light velocities. For the latter equilibrium cannot be obtained through deformation.

Summarizing this argument it can be stated, that the relativity theory accurately describes the states of equilibria of material systems in state of translation. This description is shown to be correct by large numbers of experiments and these good results could not be invalidated even if in some remote part of the universe matter existed which was kept together by forces propagated in an altogether different manner.

It is also often said, that if a velocity $C > c$ of action was found to exist then the theory of relativity ought to be modified in such a way that in the modified theory this velocity C takes the role of c . The latter assertion is also wrong in our opinion. The Lorentz deformations are given correctly when using the velocity c . If we were to transform coordinates with a kind of Lorentz transformation where c was replaced by C , then the latter would just not be suitable to describe material systems. The fact that with help of the ordinary Lorentz transformation material systems are described in a most satisfactory manner in itself justifies the theory of relativity to a large extent — and it is quite immaterial from this point of view whether or not other forms of matter exist with new properties.

§ 12. As a last question we discuss briefly the following : the theory of relativity leads to transformation properties of various physical quantities — how far can these transformation properties be understood as retardation effects?

As we have already pointed out, the field of a moving charge can be derived from retardation only ; thus the transformation of an electromagnetic field can be fully understood in terms of retardation. Matter in bulk is kept together by retarded forces and from this the Lorentz contraction and Lorentz phase shifts can be derived directly (the latter if e. g. the mechanism of a rotating cylinder is considered).

The change of mass with velocity can presumably be derived from the above consideration provided the principle of equivalence of mass and energy is postulated. Indeed, the electromagnetic energy of a system set in motion is increased by a factor $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$, the same may be supposed of the non-electromagnetic parts of the energy and thus we get the increase of mass by velocity.

The slowing down of a clock has so far been postulated as an experimental fact. However, this effect is intimately connected with the other relativistic effects. We show on hand of two models that this slowing down occurs automatically. First, consider a wheel rotating by inertia on an axis parallel to the x -axis. The wheel should be prevented mechanically from sliding along the axis. If the axis is accelerated parallel to its own direction, then the mass of the wheel increases by a factor $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ and as no rotational momentum is applied to the wheel it has to slow down its rate of rotation by a factor $\sqrt{1-v^2/c^2}$.

Secondly, consider two parallel mirrors fixed in a rigid framework at a distance a from each other. A light ray reflected to and fro between the two mirrors be considered as a clock with a period $\Delta t = 2a/c$. If the system is set into motion then the period of this clock will change. The time of period of the moving clock will be

$$\Delta t' = \frac{a\sqrt{1-v^2/c^2}}{v+c} + \frac{a\sqrt{1-v^2/c^2}}{v-c} = \frac{2a/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{\Delta t}{\sqrt{1-v^2/c^2}},$$

where $a\sqrt{1-v^2/c^2}$ is the distance of the mirrors after the framework has suffered the Lorentz contraction. We see from these two examples, even if we could not show it in general, that the time contraction is closely connected with the effect of retardation.

As far as we can see, the transformation properties of other physical quantities can be derived from those already discussed; thus it seems that Lorentz deformations, taken in a general sense so as to include the changes of all physical quantities by acceleration, can be traced to the effects of retardation.

The writer is greatly indebted to professors *L. Infeld* and *A. Rubinovicz* and their younger colleagues in Warsaw for a thorough and exciting discussion of the problems dealt with in this article.

Appendix

We consider two wheels with radii ϱ at a distance a from each other rotating with an angular velocity ω .

The velocity of the circumference be

$$w = \varrho\omega.$$

The wheels are connected by a rectangular plate (length a width b) which stands parallel to the axis of rotation. We calculate the deformation the rectangle suffers, if the system is made to move with a velocity $v \gg w$ parallel to the axis. The total velocity of the rectangle is

$$\vec{W} = \vec{v} + \vec{w}.$$

Before the motion has started the sides a and b are inclined by angles α and β towards the axis (see fig. 4). We have

$$\tan \alpha = \frac{w}{v}, \quad \tan \beta = -\frac{v}{w}.$$

When the system is put into motion the rectangle deforms and the angles α , β change into α' , β' with

$$\tan \alpha' = \frac{\tan \alpha}{\sqrt{1-w^2/c^2}}, \quad \tan \beta' = \frac{\tan \beta}{\sqrt{1-w^2/c^2}}.$$

From this we have

$$\tan (\beta' - \alpha' - \pi/2) = -\frac{vw}{c^2} \frac{1}{\sqrt{1 - w^2/c^2}} = \tan \varepsilon$$

where ε is the angle by which the rectangle is twisted. The phase shift produced by the twisted rectangle is thus

$$-\frac{avw}{c^2} (1 - W^2/c^2),$$

the latter, apart from higher order terms is the shift required for a Lorentz shift.

О ФИЗИЧЕСКОМ ИСТОЛКОВАНИИ ТРАНСФОРМАЦИИ ЛОРЕНЦА

Л. Яноши

Резюме

В результате этой работы мы утверждаем, что для того, чтобы понять преобразование Лоренца, надо рассматривать его с такой точки зрения, которая стоит ближе к точке зрения Лоренца, чем к точке зрения Эйнштейна. В особенности предполагается, чтобы скорость света не рассматривалась, как высшая граница скорости распространения каждого физического действия.

THE PHYSICAL ASPECTS OF THE WAVE-PARTICLE PROBLEM

By
L. JÁNOSSY

(Received 22. IV. 1952.)

Central Research Institute for Physics, Budapest, Department for Cosmic Rays

Summary

The basic conceptions of quantum theory are analysed. It is investigated in detail how far the results of orthodox quantum theory follow by necessity from experimental findings. As the result of this analysis it is concluded that some of the speculative results of quantum theory can be dispensed with and that it should not be impossible, at least in principle, to find a model for quantum phenomena, the model being much closer to a classical one than it is usually believed to be possible. Such a model would dispense with the unacceptable idealistic conclusions of the theory without getting in contradiction with such results of the theory which are directly established by experiment.

The model explicitly uses the assumption of action propagated with over-light velocity; it is pointed out that a straightforward analysis of experimental facts leads necessarily to such an assumption.

I. Introduction

§ 1. The orthodox quantum theory, i. e. the theory as formulated by Bohr, Heisenberg and their schools, comes to conclusions regarding causality, influence of the observer on the object of observation etc. which many physicists have been unable to accept from a general point of view, nevertheless these paradoxical formulations have been widely put up with because of the great success of quantum theory. The number of new results obtained from quantum theory is most impressive indeed. These »paradoxical« conclusions are in fact positivistic and idealistic views. The physical theory itself must, however, always be built on the concept of a world existing independently of our consciousness of it on a materialistic basis. Thus there is an acute conflict between idealistic formulations and inherently materialistic concepts. This conflict has led not only to distorted views but, in our opinion, it has handicapped the development of the theory. These are the problems we are dealing with in this article though not from the philosophical point of view but from the point of view of the physicist who wishes to clear certain physical problems which the present theory is unable to cope with.

The school of soviet physicists [1], [2], [3] has shown in a clear manner, that the philosophically unacceptable conclusions of the »orthodox« quantum theory can be separated from the physical parts of the theory itself. Thus *Bohr's* »Principle of Complementarity« is a mere burden on the theory, no actual result can be derived from it and thus, to say the least, it makes it more difficult to arrive at a clear picture.

But there are also eminent physicists in the west, who do not accept without criticism the philosophical ideas put forward by the Bohr school. Foremost there is *Einstein* [4] who is dissatisfied with the theory; when this work was nearly completed an article by *Bohm* [5] on the same subject appeared. Another example is *Planck* who in a lecture delivered in 1937 very clearly criticized the positivistic conceptions of quantum theory [6]. *Planck* made even an attempt at modifying quantum mechanics so as to eliminate some of the conceptional difficulties [7]. There are other physicists sharing similar views.

We quote at the end of this article one of these critical views.

In the present article we shall not confine ourselves merely to a philosophical criticism of quantum theory. We make an attempt to analyse the actual experimental findings upon which quantum theory is based. In particular we shall investigate which of the conclusions drawn by the orthodox theory follow with necessity from the experimental findings. We find as the result of such an analysis, in accordance with the critical views quoted above, that there is no real necessity to accept the idealistic interpretation of the experimental findings which are given in quantum theory. I have come to conclude, that at the root of the difficulty lies the fact that the quantum theory in its present form is an *incomplete theory* and that the idealistic and positivistic philosophical conclusions drawn from it are attempts to hide the incompleteness of the theory.

So as to avoid possible misconception, it should be emphasized, that I do not think the theory to be incomplete in the sense *Einstein* suggests; I do not suggest that it is possible simultaneously to ascribe values of coordinate and of momentum to a particle. In this respect I completely share the views expounded by *Blochintzev* [1a], both in his criticism of *Einstein* and in his criticism of *Bohr's* answer to *Einstein*. The incompleteness of the theory in my opinion is a rather deeper one and it is explained in § 19 of this article.

Neumann's so-called proof that quantum theory cannot be completed by the introduction of hidden parameters so as to become a deterministic theory does not affect our considerations. *Neumann* merely proves that if we accept quantum theory as a whole, proved and speculative parts in the same way, then the theory is not deterministic. However, there is no real need to accept everything that quantum theory predicts. We try in our analysis to confine ourselves to reasonably certain experimental facts only. Our analysis thus deals merely with actual experimental findings and only rea-

sonably idealized experiments. Attempting to analyse such experiments only we draw the conclusion that these experiments can in principle be described by a model which is much nearer to a classical model than it is generally believed to be possible.

This model is, of course, not in absolute accordance with quantum theory. There are cases when the qualitative model we propose leads to results which differ from those expected from the strict application of quantum theory. However, the discrepancies are in a field where many ideal experiments have been thought of but no real ones were carried out. Thus, our model is in accordance with all *real* experiments but predicts that some of the ideal experiments, if one were to succeed to realize them, might lead to other results than is usually supposed.

The discrepancies between the model proposed and the orthodox quantum theory arise mainly when applying quantum theory to macroscopic processes, while as far as microscopic processes are concerned nothing is altered. The present attempt has a certain similarity to that given by *Bohm* [5] where, however, changes in the description of processes on a very small scale are thought of. His paper came to my notice after this paper had nearly been completed. Further many of the ideas brought forward in my paper have been suggested and discussed previously by several other authors. I am thinking in particular of early papers of De Broglie and the very interesting papers of Blochincev [1b]. What may be new here is, that I try to introduce many of these features simultaneously and make an attempt thus to get a closed picture.

The main weakness of the considerations given here is that I am unable at present to propose the model in more than a qualitative manner. However, I hope with this article to draw sufficient attention to the problem so as to initiate an effort in this direction which might result in finding the quantitative solution of the problem. At the moment I merely try to show that in spite of the general belief to the contrary, a model for quantum processes is possible, at least in principle.

II. Wave and Particle Properties and Experiments

§ 2. *Analysis of experiments.* There are many experiments which individually are demonstrating very clearly either the wave aspect or the particle aspect of electrons or of photons or other elementary particles. Difficulties arise if we want to interpret these results simultaneously. There exists a view, that we are »not allowed« to consider simultaneously such experiments: — it is claimed that to mix the two aspects does not lead to reasonable results. In our opinion, it is quite true that paradoxies arise if the wave and particle aspects are stressed simultaneously — however, these paradoxies cannot be avoided by postulating that one must not think about them.

We describe a few important experiments in a qualitative manner and analyse them from the point of view of the above problems.

§ 3. *Wave properties.* Consider a screen I with two slits A and B. A second screen II is placed opposite (see fig. 1). A plane wave falls on I; if only B is open, then we get a uniform illumination on II opposite the open slit. If on the other hand both A and B are open, then an interference pattern appears on II, the latter differing from the sum of the light distributions arising from the separate slits.

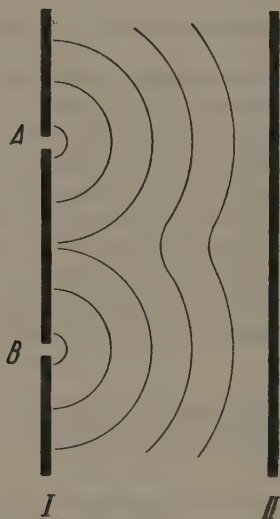


Fig. 1.

The phenomenon is well explained by assuming that the plane wave falling on A and B forms cylindrical waves with axes along A and B. One such cylindrical wave falling on II gives rise to a uniform intensity distribution. If both cylindrical waves are permitted to form, then they interfere with each other and give rise to the interference pattern.

This experiment thus carried out with light demonstrates very clearly the wave nature of light. A corresponding experiment carried out with a beam of electrons demonstrates similarly the wave nature of an electron beam. (One cannot use two slits in the electron case but instead has to use a crystal lattice; however, the diffraction on a lattice does not differ in principle from that formed by two slits.)

There are very many other interference phenomena; these prove with great precision that light is a wave phenomenon and further that these waves are electromagnetic waves obeying Maxwell's equations. In particular, there are interesting experiments which show that a radiating atom emits spherical waves with polarization corresponding to dipole radiation; such experiments were carried out by *Selényi* in 1911 [8] and independently by *Schrödinger* [10]. These experiments show that parts of spherical waves emitted into different directions can be brought to interference with each other. Interference arises to precisely such an extent and shows such polarization [9] as expected theoretically supposing the radiation to consist of spherical waves emitted by dipoles.

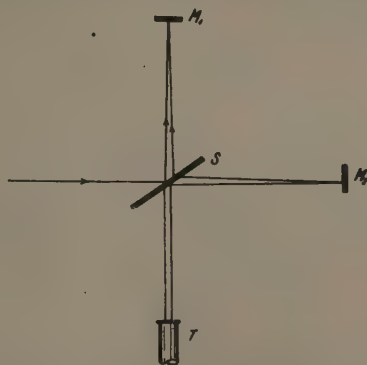


Fig. 2.

A particular kind of interference experiment is the reflection of a beam of light on the surface of a transparent solid or mirror surface. A beam of light can thus be split into two; the parts of the beam are coherent and if brought again together they give rise to interference fringes. The typical arrangement is Michelson's interferometer. (See fig. 2.)

§ 4. *Particle properties.* The particle property of light is demonstrated by *Einstein's* photo-electric effect. A beam of light consists of single photons each carrying an energy $h\nu$. As these photons are independent of each other a weak beam shows fluctuations of intensity. Such fluctuations have been extensively studied by *Vavilov* [11].

The composition of a beam of photons can be also demonstrated with electron multipliers. The latter instrument responds to the incidence of single photons: A single photon falling on the cathode of the electron multiplier, if giving rise to a photo-electron, initiates an electron avalanche which by means

of amplifiers triggers some mechanical gadget. Thus, by means of the electron multiplier we are able to count the photons of a beam directly.¹

By means of electron multipliers we can measure the intensity of a beam as the rate of photons per unit area. We may thus measure the intensity distribution e. g. in an interference pattern. Similarly we can measure the division of intensity in the parts of a divided beam by counting the photons proceeding each way.

In so far as we measure large intensities we can say that, considering a single frequency ν only, the photon density in any illuminated part of a system is proportional to the energy-density as calculated from Maxwell's equations.

New problems arise, however, if we consider small light intensities corresponding to few photons only.

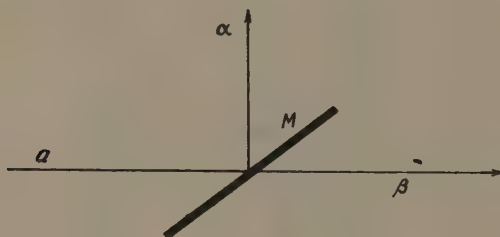


Fig. 3.

§ 5. *Behaviour of single photons.* Consider a weak source of light which emits N photons per sec in a parallel beam. If we place a shutter before the light source which, when operated, opens for a time $\tau \ll 1/N$ then for most of the operations of the shutter no photons will escape. But taking those cases where photons do escape, they will escape mostly singly and only in rare cases will a group of more than one photon escape. Such a light source can be built in practice, and it yields well separated single photons.

We consider what happens if we let single photons one after the other fall on an optical arrangement. The simplest case is a beam falling at 45° angle on a half-silvered mirror M . (See fig 3.) The beam a is split into α and β , a reflected and a transmitted beam. What happens to each photon? As was shown experimentally by Cosyns,² each photon is either reflected or transmitted if we are

¹ The efficiency of the electron multiplier for recording single photons is of the order of $1/20$ — $1/200$ according to details of the arrangement. This efficiency depends on the probability for a photon falling on the cathode to give rise to a photo-electron. Thus the electron multiplier does not count every photon but only one out of n , where n is a characteristic of the multiplier. Thus a certain precaution is necessary when interpreting results of photon counting.

² According to a personal communication *M. Cosyns* has carried out an experiment of this kind several years ago but has not published his results. A similar experiment is in course of preparation by *A. Adam* in my laboratory.

to base our conclusion on the following experimental result. One electron multiplier is placed into the beam α and another into the beam β . If a photon were to divide into two, then it would cause a coincidence between the multipliers. The experiment has shown, however, that two such multipliers do not record coincidences beyond those which are to be expected to be caused by independent photons accidentally crowded together into short time intervals. Thus each photon falls on one of the multipliers only.

A similar behaviour is expected of single photons falling on a grating. Each photon passes through the grating and then proceeds to the screen where the interference pattern appears. If we replace the screen by a set of electron multipliers the cathodes of which cover the area of the screen, then each photon will trigger (at most) one electron multiplier. Thus every photon appears in one point of the screen only.

Repeating such an experiment several times, thus throwing one photon after the other on to the grating and marking the places where photons are found, gradually an interference pattern will develop. We expect to find the relative number of photons falling on the individual electron multipliers, apart from statistical fluctuations, to be proportional to the intensity of the interference pattern integrated over the area of the cathode of the instrument.

The remarkable feature of this experiment is, that the photons thus employed are necessarily independent of each other. Indeed, the time intervals between the single photons can be made arbitrarily large so as to make any mutual connection between the photons impossible. Furthermore, instead of sending say 1000 photons through one arrangement, we can instead send one photon each through 1000 similar arrangements, and it is of little doubt that collecting the results of the 1000 arrangements we would get the same pattern as we do from the 1000 photons in the first case.

The above experiment has not been carried out so far in the way described here; nevertheless there is little doubt that it would give the result thus predicted if it were actually carried out. We are certain of this for two reasons. 1. *Vavilovs* [11] experiments which show that the intensity fluctuations due to photon structure of light are independent in different parts of one interference pattern. 2. The diffraction image produced by a grating is independent (inside very wide limits) of the intensity of light.

To 1. we note that the independent fluctuations indicate the arrival of independent photons in various coherent parts of the image. To 2. we note that if the interference pattern would in any way be connected with the interaction of photons, then this interaction would necessarily be reduced if the light intensity and therefore the photon density was reduced. There is no sign of such an effect.

We have thus good reason to suppose that the interference pattern produced by a grating comes about by the individual and independent contributions of

single photons. Thus each photon, although it is absorbed in a single point contains *as a tendency* the interference pattern as a whole. Each photon interferes with itself and is eventually absorbed, preferably in a region where the interference pattern shows high intensity.

III. Synthesis of Wave and Particle Properties

§ 5. Considering the interference and photon experiments simultaneously the following picture seems to account adequately for both kinds of phenomenon at the same time. Light is emitted in quanta. Once a quantum is emitted it takes the shape of an electromagnetic field and moves according to Maxwell's equations. The field persists until the quantum is absorbed; in the process of absorption the quantum appears as a photon. The absorption must be supposed to be a particularly violent interaction of the electromagnetic field with an atom or an electron (the violence of the interaction may be caused by some kind of resonance). As the result of this interaction the whole wave field is made to contract and is sucked up by the absorbing centre. An interacting centre is the more likely to succeed in absorbing a photon the larger the intensity of the field in the immediate vicinity of the absorbing centre at the moment of absorption.

To complete this picture, we must consider also the possibility that a photon starts violently to interact with more than one absorbing centre at the same time, in such a manner that each of the centres would succeed in absorbing the wave if the other centres would not have been encountered. In such a case a complicated process must be assumed to set in, the process finally ending with one of the centres succeeding to overcome the interaction of the others, and absorbing the whole of the photon.

The above model accounts qualitatively for both interference and photon properties. This model seems to be the only obvious and natural mode of interpretation of the actual experimental findings. This picture has, however, never been seriously considered before now because it contains two difficulties. We consider these in the following.

1. The constriction of the wave field requires some action propagated with over-light velocity. Indeed, if a spherical wave emitted from O meets a point A where interaction sets in, then so as to extend the interaction to the part of the wave moving away from A an action with over-light velocity is needed to catch up with the part of the wave moving away into the opposite direction.

In our opinion this is no real difficulty, our views about over-light velocities are explained in the previous article. I would even venture to claim, that the photoelectric effect together with experiments on wide-angle interference make the assumption of an action propagated with over-light velocity necessary.

The unprejudiced experimentator would certainly claim that these two experiments together establish the existence of action with over-light velocity.

2. The second objection to our picture of the contracting wave is of a philosophical nature. The latter is, however, in our opinion unjustified.

It is claimed that we have to regard radiation either as consisting of waves or of particles, we must not mix the pictures. The argument for not admitting such a mixed picture is connected with *Heisenberg's* uncertainty relation. It is pointed out that we cannot obtain direct experimental knowledge of the distribution of the intensity inside a wave, or even of its spacial extension, provided we attempt to show that the same wave is capable of interference

Take the *Selényi* experiment as an example. Suppose a point source of light emitting photons one after the other, in sufficiently large intervals, so as to make interaction between the individual photons impossible. If we surround the source with electron multipliers arranged on the surface of a sphere around the source then the photons will trigger the multipliers and, statistically, we can determine the intensity distribution. If the source is such that the light is polarized parallel to the z -axis then we find the relative number of photons to be $\sim \sin^2 \vartheta$ inside a solid angle $d\Omega$ in a direction inclined by ϑ to the z -axis.

From this experiment we can thus establish the statistical distribution of photon directions — but we cannot establish that any of these photons did possess a spacial extension and that by virtue of this extension each of them could have been made to interfere with itself. Indeed, we destroy the photons when recording them with the electron multiplier, and thus the photons once located by the electron multiplier will be unable to take part in an interference pattern further on. On the other hand removing the multipliers, we can by means of reflections, as *Selényi* actually did, bring divergent parts of each spherical wave to interference and produce at some distance the interference pattern.

We can thus establish in these experiments, with one set of photons that the radiation is emitted into all directions: we cannot, however, investigate whether or not the individual photons might have given rise to any interference if they had not been absorbed. Considering another set of photons we may allow them to build up an interference pattern but we cannot establish of these latter photons whether they have started in a spherical wave distribution or not.

The positivistic conclusion out of all this is, that as we cannot demonstrate on the same set of photons both the spherical distribution and the capability of interference, it is claimed to be »senseless« to conclude that both properties exist simultaneously. This positivistic view is, however, quite unjustified; we can safely rely on measurements carried out on two separate sets of photons, and conclude that the two properties established in the two experiments are real properties of each individual photon.

§ 7. So as to demonstrate our assertion quite clearly, let us suppose that we have an arrangement which we can easily rearrange so as to either surround the source of light with electron multipliers or to have the interference arrangement. We can now register every other photon with the one arrangement and those in between with the other arrangement. Thus the 1st, 3rd, 5th, ... photon emitted we use to establish the directional distribution of the emitted light, the 2nd, 4th, 6th, ... photon we use to produce an interference pattern. It is now clear that we might just as well have used the photons no 2, 4, 6, ... etc. for the first and the photons no 1, 3, 5, ... for the second kind of experiment and this would have changed nothing in the result. Furthermore it is clear that after having carried out a large number of experiments of both kinds, we can safely attribute both properties thus ascertained for a large number of photons, to be properties of *all* photons emitted under similar conditions.

This kind of conclusion is in fact the type of generalization one has to make at every step when building a theory from experimental data. The fact that we could not possibly have made the two kinds of measurements on the same photon but only on two different photons is usually stressed very much by the Bohr school. However, in our opinion this is not really an important fact as can be seen in the following example.

We consider hundred loaded shells. We examine one after the other. We examine the first shell by opening it, taking the explosive out and analysing it chemically. The second we do not open but explode it. The third we open again, the next we explode and so on. It would be ridiculous to conclude after finishing with all shells that fifty of the shells contained explosive of a certain chemical composition (ascertained by analysis) but that we do not know whether those fifty shells could have been exploded; the other fifty certainly did explode, but we do not know whether they contained the specified explosive. In a terminology reminiscent of that used in connection with the uncertainty relation we ought to say that a shell *either* contains explosive *or* it can explode! In fact there is an »uncertainty relation« to the effect that by ascertaining through chemical analysis the contents of the shell we make it impossible for it to explode, or by exploding the shell we make the chemical analysis impossible. While this reciprocity is so far correct — we still do not assume that we create the chemical compound by analysing it, but we are completely satisfied that if we find this compound in a large number of shells then it is contained in most other shells as well, although we have not taken the trouble to carry out the analysis of the contents of these remaining shells. Thus by induction we generalize our findings on a sufficiently large sample and we naturally assume that these findings can be extended to cases not included in the sample. Thus analysing chemically the contents in one sample, blowing up the shells of another sample, we conclude that the rest (which has not been investigated at all) each contains the explosive of a certain chemical composition and also could be made to blow up.

Returning to the photon example, we are quite satisfied that each photon starts its journey as an extended wave front, and we are satisfied from our experience on photoelectric absorption that the whole of this extending wave-front can be absorbed locally by a small obstacle placed in the way of the wave front.

§ 8. Returning to the first objection against our picture of constricting waves we wish to note the following.

Disregarding the positivistic objections, we are led directly from the experimental facts described in § 5 to the picture of the constricting wave. Thus, the unprejudiced analysis of the experiment leads to action with over-light velocity. It cannot be argued that this analysis must be rejected, as it contradicts the experimentally well established theory of relativity. The latter theory, in its usual formulation merely claims that *Einstein's* interpretation of the Lorentz transformation would be invalidated if action propagated with over-light velocity was found to exist. The experimentally established physical results of the theory of relativity are, however, based mathematically on the Lorentz transformation and are largely independent of whether we interpret this transformation in the way of *Einstein* or in the way of *Lorentz* and *Fitzgerald*. The constriction hypothesis of the photon is thus incompatible with *Einstein's* interpretation of the Lorentz transformation but it is compatible with all physical results (to be distinguished from speculative results) derived from the relativity theory.

The discrepancy between the constriction hypothesis and *Einstein's* theory comes out in the following manner. The constriction of the photon must be supposed to be a perturbation of the electromagnetic wave starting at the absorbing centre and extending with over-light velocity to other parts of the wave. Thus the interaction between wave and absorbing centre is the *cause* of the constriction, the constriction being the *effect*. This process, viewed from a sufficiently fast moving observer would appear to be different provided the observer has adjusted his clocks and measures according to the prescriptions of the relativity theory. This observer would find that the perturbation has started somewhere at the periphery of the wave and has proceeded towards the centre of perturbation. The latter picture reverses cause and effect and is obviously unacceptable.

Thus, if we maintain that the constriction of the wave is *caused* by the perturbing centre, then we have to reject the observation of the fast moving observer as incorrect. This means that the system of the fast moving observer must be considered to be *really* distorted in the sense of the foregoing article.

IV. The Interpretation of Schrödinger's Wave Function

§ 9. The considerations about photons can be extended to the problems of electrons or other elementary particles. In this way the question as to the precise significance of the wave functions arises. There are three versions which have been considered.

1. *Schrödinger's* original conception of the ψ function is that it represents a smeared-out electron. Thus $|\psi|^2 dV$ is the actual matter contained in an element dV . This most attractive picture had to be dropped, as it could not be extended to cases of more than one electron.

2. *Born's* interpretation. $|\psi|^2 dV$ is the probability of finding the electron inside dV . This is a particular case of the following more general assumption

Supposing O to be an operator corresponding to the measurement of a certain physical quantity. The eigenfunctions of this operator may be written as ψ_1, ψ_2, \dots the corresponding eigenvalues as O_1, O_2, \dots . The state ψ of a system can be developed in terms of these eigenfunctions as

$$\psi = A_1 \psi_1 + A_2 \psi_2 + \dots \quad (1)$$

The significance of A_k is that in case of measurement $|A_k|^2$ is the probability that the result of the measurement will be O_k .

The following idealistic consideration is usually added to *Born's* hypothesis:

If as the result of measurement we find that the physical quantity O possesses the value O_k , then our knowledge of the state of the system has changed by this measurement and in consequence also the wave function has changed. To begin with we have attributed a probability $|A_k|^2$ that the system has the value O_k , after measurement we know for certain that the system has this value. The state where the system possesses with certainty the value O_k is expressed by the wave function ψ_k . Thus it is supposed that the *measurement* brings about a sudden change of state

$$\psi \rightarrow \psi_k.$$

This is the essence of the so often quoted »influence of the observer on the system«. We shall come back to this conception further below and give a detailed criticism.

3. The third mode of interpretation of the wave function is the statistical interpretation, probability being used in an objective manner. It is thus claimed that having many atoms each in the same state ψ and carrying out the same measurement on each of them, then the results will scatter. The probability of finding a particular value O_k will be $|A_k|^2$. Thus among N measurements about $|A_k|^2 N$ will lead to the value O_k .

§ 10. *Analysis of the three interpretations.* The third point of view, accepted by many physicists, is certainly correct as far as it goes. I endeavour to show

that it does not contain the whole of the phenomena accessible to us. The shortcomings of the hypothesis 3. can be demonstrated e. g. on hand of the interpretation of the two-slit interference phenomenon. (See § 3, fig. 1.)

Consider particles coming from the left and falling on the two slits. Placing counters behind the slits, covering the slits completely we can with help of the counters ascertain for each particle whether it falls on slit A or on slit B. Of course, most particles will fall on neither of the slits but will be absorbed in the screen; but we are only interested in those which happen not to be absorbed in screen I.

The particles located when attempting to enter one of the slits are absorbed in the process of location and thus they will never reach the screen II. If we remove the counters from the slits, then the particles falling on the slits will reach the screen II and statistically they will form an interference pattern.

Having no positivistic prejudices, we assume that the particles which were not located by counters but were allowed to pass and thus gave rise to the interference pattern *might have been located* on their way passing through slit A or through slit B. If on the strength of this perfectly correct assertion we conclude that each particle *has passed through one slit only* and has afterwards descended on screen II, then we get into grave difficulties. This difficulty becomes very clear, if we consider the intensity in the vicinity of an interference minimum. Indeed, taking the particles passing through A, we find that they avoid falling on II near the minimum. If we now cover the slit B, then the particles passing through A will no longer avoid this area. Thus there must be particles passing through A and being redirected from the vicinity of a maximum to that of a minimum by the closing of the slit B. We cannot determine precisely which particles are so influenced, but as the intensity from the vicinity of the maximum is spread out over the whole area of the interference pattern as a direct result of the closing of slit B, there must exist individual particles which, although they have passed through A, are influenced by the circumstance whether B is open or closed.

§ 11. This strange result could be accounted for if we were to assume that particles going through A can interact with those going through B. However, such an interaction can be excluded by letting the individual particles arrive after long time intervals one after the other, so that the fate of each particle is completely decided before the next particle arrives. Thus the interference phenomenon cannot be interpreted in terms of mutual interaction of the individual electrons.

If we grant that the particles are independent of each other, then we must admit that the interference experiment proves conclusively that *each particle must have passed through both slits A and B*. Indeed, if a certain number of particles had passed only through A and the rest only through B, then these

two sets of particles being independent of each other would give rise on the screen to a distribution

$$f_{A+B} = f_A + f_B$$

where f_A is the distribution of those particles going through A only and not being influenced by B, and similarly where f_B is the distribution of the particles going through B but not being influenced by A. In fact, we find that near the minimum

$$f_{A+B} < f_A + f_B$$

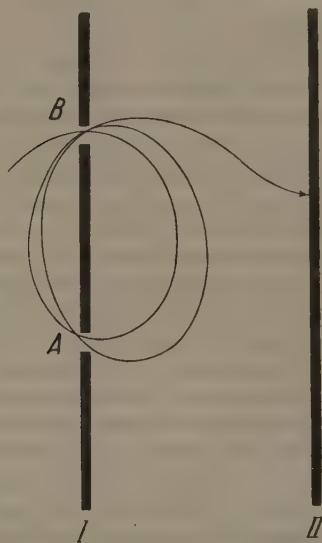


Fig. 4.

and near the maximum

$$f_{A+B} > f_A + f_B.$$

Thus, both slits have an influence on the individual particles passing between the screens.

There are two ways imaginable as to how both slits are capable of bearing an influence upon individual particles.

Firstly: One might suppose that each particle carries out a most complicated and violent motion, so that it traverses both slits several times before it hits the screen II and is absorbed. (See fig. 4.) Accepting this hypothesis for the moment we expect that placing counters behind the two slits, a particle is absorbed at its first attempt to enter either A or B. If on the other hand we leave

both slits open, then the particle circulates on a complicated path which is effected by the positions of both slits — the motion comes to an end if the particle hits either of the two screens and is absorbed.

The above picture seems, however, quite phantastic, one of its great difficulties is that the screen I would have to absorb the particle at its first encounter. Now it is difficult to imagine that the particles could several times in succession fall on the narrow slits without first falling on the much larger absorbing area of the screen I. Thus the above picture does not seem worth consideration.

Secondly: Supposing, somewhat similar to *Schrödinger's* original hypothesis, that each particle is in reality an extended wave packet. The wave coming from the left falls on both slits and interferes to the right of I. When absorbed the whole wave contracts into a small region around the absorbing centre.

The latter picture is analogous to that proposed for the photon, it allows us to interpret the whole state of affairs: Consider one particle, the corresponding wave front falls on I. If the slits A and B are open, then the wave, provided it is not absorbed by I, passes through the two slits, the two parts interfere and eventually the whole is absorbed in one point of II. The probabilities of absorption in the various parts of II are proportional to $|\psi^2|$.

In this way we understand the experimental results obtained with the two arrangements considered further above: firstly, the arrangement with the slits covered by counters and secondly the arrangement with open slits and indicators on the screen II. In the first arrangement the wave falls on *both* counters but is absorbed by one of them. Which of the two counters absorbs the particle may depend on phase relations etc, statistically both counters have about equal chance if the slits are similar.

If the slits are left open, then the wave contracts only after contact with screen II (unless of course it has been absorbed by the screen I outside the area of the slits).

The contraction takes place preferably near an interference maximum.

§ 12. *Dirac* [12] in his book »Principles of Quantum Mechanics« p. 8 makes the following statement about a similar problem:

»For a photon to be in a definite translational state it need not be associated with one single beam of light, but may be associated with two or more beams of light which are the components into which one original beam has been split.« ... »Let us consider now what happens when we determine the energy in one of the components. The result of such a determination must be either the whole photon or nothing at all. Thus the photon must change suddenly from being partly in one beam

and partly in the other to being entirely in one of the beams. This sudden change is due to the disturbance in the translational state of the photon which the observation necessarily makes.«

The above statement is closely analogous to our assertion of the constriction of a wave function, however, usually a different meaning to this constriction is given.

We give a second quotation out of *Dirac's* book (p. 9) which seems to us relevant in connection with the problem of the behaviour of single particles.

»Some time before the discovery of quantum mechanics people realized that the connection between light waves and photons must be of a statistical character. What they did not clearly realize, however, was that the wave function gives information about the probability of one photon being in a particular place and not the probable number of photons in that place. The importance of the distinction can be made clear in the following way. Suppose we have a beam of light consisting of a large number of photons split up into two components of equal intensity. On the assumption that the intensity of a beam is connected with the probable number of photons in it, we should have half the total number of photons going into each component. If the two components are now made to interfere we should require a photon in one component to be able to interfere with one in the other. Some times these two photons would have to annihilate one another and other times they would have to produce four photons. This would contradict the conservation of energy.¹ The new theory, which connects the wave function with probabilities for one photon, gets over the difficulty by making each photon go partly into each of the two components. Each photon then interferes only with itself. Interference between two different photons never occurs.

The association of particles with waves discussed above is not restricted to the case of light, but is, according to modern theory, of universal applicability«.

From these quotations, which represent the accepted view of quantum mechanics, we see that one has to suppose that a photon or an electron meeting obstacles spreads out into a superposed state. The measurement causes such a disturbance that the superposed state is made suddenly to change into a single one in the manner $\psi \rightarrow \psi_k$. This sudden change may be termed constriction, it may represent a real constriction in space, e. g. if a photon is absorbed or an electron is caught by an atom, but it may represent a »constriction in Hilbert space« e. g. a transition from a complex state into a simple one.

The difference between my own point of view and that of the orthodox view is this that I think this constriction is a real process which ought to be

¹ Such an assumption is also excluded by Vavilov's fluctuation experiments. (L. J.)

investigated and described; the orthodox view is that the constriction is not a real process but only something happening in our mind.

Dirac carefully avoids to make a statement as to the nature of the constriction, he only emphasizes that the constriction is something that cannot be pictured by a model i. e. — according to *Dirac* — by a classical picture. Why such a description should be impossible is not explained, although possibly he reasons why a detailed description is taken to be impossible are that 1. such a picture would involve by necessity over-light velocity 2. the picture would be inconsistent with a linear theory; the latter point we discuss further below. However, if we do not exclude over-light velocities and non-linear theory, there seems no valid argument left why it should be impossible to account for the details of the constriction process: although mathematically the detailed description of the constriction might amount to a formidable problem.

We see thus that according to *Dirac* by observing the photon we disturb it in such a way that as an effect of the disturbance caused by the observation, it changes its state from one in which the photon was spread over several beams to one where it becomes confined to one only. The Bohr school interprets the phenomenon in the following way: the wave field describes only our knowledge of the photon. After the path of the photon has been split we do not know whether the photon is in the one beam or the other. This »state of knowledge« is described by a wave field spread over both beams. If the observation ascertains that the photon is actually in one of the beams, then as the result of such an observation our state of knowledge changes, namely from the uncertainty in which beam the photon is — to a certainty that the photon is in a particular beam. This sudden change of knowledge is supposed to be described by the sudden change of wave function.

The above description supposing the wave function to represent merely our knowledge of the system is, however, completely artificial and inadequate. As we have tried to show on many examples, the wave function does correspond to the real state of the system and not to our subjective knowledge of it — therefore the wave function cannot be affected by what we happen to know about the system. So as to get rid of the mystic rôle of the observer about which so much is written, it is useful to describe in somewhat more detail what a real observation is like. What is e. g. the process which is supposed by *Dirac* to locate the photon? In discussing what is an observation, it is essential not to be satisfied with ideal experiments using γ -ray microscopes etc., but to analyse real experiments which can be performed in the laboratory if challenged. The mysticism which is usually found in connection with the rôle and the effects of observation are not in a small measure to be attributed to the fact that problems are usually not discussed in terms of possible and feasible experiments.

§ 13. An important characteristic of a real experiment is, that the final reading or observation etc. refers to a macroscopic effect. If we experiment on a

microscopic effect then we have to use some arrangement where the microscopic event is made to trigger one or more avalanches which amplify the microscopic effect to a macroscopic one. Although this is nearly trivial, it may be useful to describe the main types of such experiments.

1. *Recording of elementary particles by photographic plates.* The elementary particle hits a sensitive grain in the emulsion. A grain in which a certain (small) number of ions are produced can be developed; i. e. the microscopic process of producing a few ions initiates a chain reaction and a macroscopic grain is made to develop.

2. *Cloud chamber observation.* By means of collisions ions are produced. Each ion is under the suitable circumstances capable shortly after the expansion of the chamber to collect rapidly liquid molecules and thus grow into a macroscopic drop. Thus the macroscopic drop is brought about by an avalanche started by a microscopic event.

3. *Counters, operating with gas discharge.* The microscopic elementary particle ionizes at least one gas molecule inside the counter. (In a normally working counter one ion is sufficient to trigger the counter.)

The ion is accelerated by the electric field inside the counter and produces an ion-avalanche. The avalanche grows to macroscopic dimensions and an electric disturbance results which can be recorded by macroscopic means.

4. *Electron multiplier.* A photon collides with an atom and gives rise to a photo-electron. (This collision may take place inside or on the surface of a cathode.) The electron is accelerated by an outside electric field and is made to give rise to secondary electrons. The secondary electrons each give rise to several tertiaries and in about ten generations an electron avalanche of such size develops, that it can be recorded by macroscopic means.

5. *Observation of small numbers of photons by the naked eye.* The fluctuation experiments described and completed by *Vavilov* show that the human eye is sensitive to small groups of photons. This sensitiveness amounts also in essential to complicated chain reactions triggered by the primary microscopic effect.

The important feature of the microscopic event having triggered a macroscopic one, is that the macroscopic event possesses a finality which cannot be reasonably challenged and which cannot possibly be made conditional on an observer.

Whether or not a mechanical counter has clicked is obviously independent of the circumstance whether or not there was somebody there to hear it. (This is trivial for the materialist but nevertheless it is challenged by extreme positivists.) But the important conclusion is that since the clicking of the mechanical gadget is an objective reality, the existence of an ionized atom somewhere which triggered the avalanche at the outset is also an objective reality.

Let us discuss this on hand of an experimental arrangement which it need be, can be constructed. Consider the arrangement shown in fig. 5. The

arrangement contains three main parts in form of suitable discharge tubes. The first tube C_1 and the third tube C_2 record the entry and exit of one electron into the arrangement. The middle tube is divided (electrically) into a number of sections. A set of amplifiers records in which, if in any, of these compartments the passing electron has given rise to at least one ion. Such a discharge tube is of conventional type and can be constructed in a laboratory. The arrangement is supposed to register ionisation given rise to by single electrons passing through it.

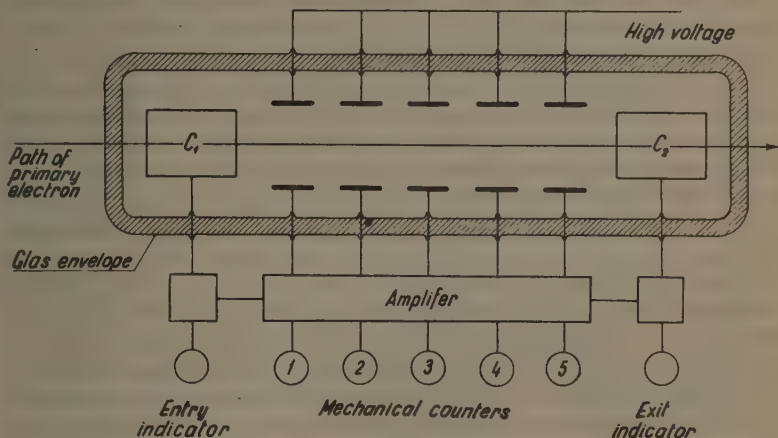


Fig. 5.

The amplifiers are triggered by electric discharges which in their turn are initiated by ions which might be left in the trail of the primary. The discharge develops only if an electric field is applied which accelerates the ions present.

The location of the ions need not necessarily be made immediately after the passage of the primary. We may switch on the collecting field some time after the passage of the primary electron and establish somewhat later where ions have been produced. In case of a delayed observation we have to prevent the ions to diffuse too far from their point of formation, say by the application of a suitable magnetic field.

Suppose, say, that the middle compartment consists of five sections then a typical record would look like this

$$0 \times 0 0 \times$$

where 0 signifies no ion and \times at least one ion. The above record thus shows that at least one ion has been produced in the second and in the fifth section of the middle chamber.

Recording many electrons one after the other we may find that in average ion formation in the five compartments takes place with certain relative frequencies p_1, p_2, \dots, p_5 . The latter quantities can be regarded as probabilities of ionizing collisions in the five sections.

§ 14. Let us consider, how this process is being described by quantum theory. The incident electron may be described as a wave packet. It must be several de Broglie wave-lengths long, but its length is nevertheless short, as the times of entry and exit into the tube follow in close succession. The atoms in the rare gas inside the tube are disturbing centres; they can be introduced as perturbations into the equation of the free particle. In the initial state we have thus a state which contains neutral atoms only and an electron in form of a wave packet. In the final state we have a wave function which consists of the superposition of the initial state and of a large number of such states in which one or more gas atoms are in ionized (or excited) states. Thus as the result of the passage of the primary a state is brought about in which every atom is affected and ionized with a certain small probability.

Thus, the wave function describing the final state has about the following form

$$\psi = \sum A_k \psi_k$$

where $\psi_k = \psi(k_1, k_2, \dots, k_N)$ is the wave function describing the state where the atoms k_1, k_2, \dots, k_N are ionized. According to quantum theory, a measurement is supposed to introduce such a disturbance as to change the wave function ψ from this superposition to a simple one where there are a definite number of atoms inside definite sections definitely ionized and the other atoms are definitely left neutral.

Thus we expect measurement to bring about a change $\psi \rightarrow \psi_k$. But what is the measurement which causes the transition $\psi \rightarrow \psi_k$? The switching on of the collecting field cannot be made responsible for this transition. Indeed, by switching on the field we initiate the collection of ions and the triggering of electron avalanches which later make certain counters to click. But it is clear that the switching on of the collecting field in itself is not responsible for the transition $\psi \rightarrow \psi_k$. The collecting field is, from the point of view of wave mechanics, merely another time dependent perturbation to the Schrödinger equation, and it causes each atom of the gas to move in so far as it is ionized. Thus, every atom starts to move with a certain probability and starts to produce secondary ions which are now doubly hypothetical as they are to be attributed as the probable result of a collision which has only in so far arisen as the colliding particle is ionized. The ψ state contains the colliding ions only as probably ionized — and in so far as an atom is not ionized it is not set in motion by the electric field.

Out of all this an immensely large number of probable electron avalanches arise, these trigger with certain probabilities various combinations of the

mechanical counters — but somehow, the hypothetical mist eventually clears, and in the end exactly one set of counters clicks.

The extreme positivists say that the whole of the amplifier together with the mechanical counters can be taken to be part of the quantum mechanical system which has as its final state superpositions of wave functions, each of which refers to a certain combination of triggered counters. In this extreme view the counters are in this final state triggered with certain probabilities only, and they »make up their minds« to be triggered or not in the moment his Lordship the observer enters to look at them.

This of course is phantastic nonsense. However, the question has to be answered at what stage does the single state emerge from the originally mixed state, and how does it emerge. It is quite certain that the counters will click in a definite manner, independent of any observer, and at some stage before it came to the triggering of counters the configuration had already been fixed.

It would be the simplest to assume, that already to begin with the primary has to ionize particular ions only and that the combined wave function describing the various possible states refers to the statistical average only. The latter assumption is, however, incorrect because it leaves out the experimentally established fact of the interference of simultaneously co-existing states; the interference in fact gives the essential difference between quantum mechanics and the old classical theory and must not be dispensed with.

§ 15. Thus in a complete description of the phenomena it is essential to assume that in the microscopic stage of the process there do occur superposed states — but these states cannot be really stationary. It must be assumed, so as to account for the discrepancy between interference effects which prove the co-existence of stationary states, and the fact that observations of the kind described above lead to definite results, that we have to modify to some extent the accepted formalism of quantum theory. An assumption must be formulated to the effect that superposed states can co-exist for some time — but such superpositions are not strictly stationary; it must be assumed that after a sufficient time certain superposed states gradually change into simple states.

We demonstrate the necessity of the latter assumption on a second example dealing with the following real experiment. A primary is passing through a chamber filled with low pressure gas; the pressure is so small that the primary suffers in average only about one collision in its passage. The effect of this collision (or collisions) is to excite some of the atoms. After the passage of the primary the excited atoms will emit a photon each of specified frequency. Suppose the light to be collected, and thrown on a grating; suppose behind the grating electron multipliers arranged so that each of the cathodes cover the positions of one possible spectral line. After the passage of a primary, there will thus occasionally one (or sometimes more) of the multipliers provide signals showing that as the result of the passage of the primary certain atoms

were excited into specified states and that those excited atoms have later emitted photons with frequencies corresponding to their state of excitation.

The orthodox quantum description of this process would be (in analogy to the previously described case) as follows.

The primary particle is represented by a wave packet and the atoms of the gas by the usual wave functions corresponding to the atoms in ground states. As the effect of the interaction between primary and gas atoms, the wave function changes into one where each atom is represented as a superposition of the wave function corresponding to its ground state and those corresponding to its excited states. Owing to spontaneous emission of photons, the wave function changes further, the excited atomic states die down and in the end we get a wave function superposed of many components each component containing a specified number of photons. But as far as we take the superposition seriously, these photons exist simultaneously, but each is attributed to a probability amplitude much less than one.

The observation is now supposed to disturb this complicated superposition of states so as to reduce it to a simple state where the ghosts of photons disappear and real photons existing with 100% probability appear.

Just as in the previous example it is difficult to see what precisely this observation is that has the magic effect of clearing up the complicated state, and which brings about a simple state. If in our example we place the electron multipliers sufficiently far from the grating we can delay the last step of the observation considerably. Thus, as far as we take the triggering of the multipliers as the »real observation« we can let this act happen very much after the actual collision has come to an end. It does not seem likely that the superposed state should persist for a particularly long time just because we have chosen to place the electron multipliers far from the grating. It seems natural to assume, that in reality it is not the »observation« which brings about a definite state of affairs, but rather that the complicated superposed state has an inherent tendency to simplify itself. Thus e. g. a state which contains two photons each with half probability is not really stationary, but such a state, if left alone will gradually develop into a state where the one photon exists with 100% probability and the other has disappeared altogether.

V. A Qualitative Attempt at Modification of Wave Mechanics

§ 16. In the previous sections we have described and analysed experiments on single photons and single elementary particles recorded by various counting devices. The experimental findings of *Vavilov*, using small light intensities so that the effects of individual photons become apparent through fluctuations are also important in our analysis of the behaviour of individual photons. The experiments considered are real experiments, i. e. such experiments which

either have actually been carried out or which might be carried out with standard experimental equipment.

Our aim is to analyse these experimental findings without prejudice. We try thus to see what would have been the interpretation of these experimental findings given by, say, a classical physicist, knowing nothing about the postulates of quantum theory. Would such a physicist have felt that he has to give up to interpret these findings in terms of classical pictures or — not hampered by prejudices — would he have constructed a model describing electrons and photons?

My opinion is, that such a physicist would in fact have constructed a classical picture. Why the actual development of physics has not led to a picture but has gone in a different direction, namely to assert that such a picture is impossible, may have two reasons. Firstly, the experiences which are at our disposal allow us now to overlook simultaneously many phenomena which have been cleared up gradually one by one. Secondly, and this may be the more important reason, some of the new ideas of relativity and quantum theory were so strongly in harmony with bourgeois ideology, that these ideas got an uncommon support from bourgeois society and this strong support made it more difficult to clear up the situation. Some of the physicists with wider conception did see the difficulties inherent in the modern ideas, as shown i. e. by the quotations from *Planck* attached to this article.

We attempt now to sketch qualitatively such a classical picture for quantum phenomena. This sketch is only qualitative, as I am unable to give a closed theory.¹ At the end of this section I discuss, however, as an illustration of these qualitative considerations a certain modification of the Schrödinger equation in a special case; this illustration is only meant to show that our assertions are mathematically not impossible.

§ 17. The qualitative picture, as to the behaviour of a photon or any elementary particle, summarized from the various considerations of this article is essentially as follows.

The photon in free space spreads essentially according to Maxwell's equations; thus, the photon is supposed to be an extended structure with a density proportional to the energy density of the field. The behaviour of the photon is, however, for two reasons not fully accounted for by Maxwell's field. 1. It is not accounted for why a frequency ν is always emitted in quanta of energy $h\nu$, 2. Maxwell's equations give no explanation why a whole extended wave, if absorbed, is absorbed in one point.

Maxwell's equations give a good account of the average behaviour of many photons; however, experiments on single photons are at our disposal and

¹ *Max Planck* [6] has also proposed modifications to the quantum formalism: the difficulties which led *Planck* to his considerations have much in common with the problems discussed here.

the results of these experiments cannot be accounted for even approximately by Maxwell's equations. A theory which gives a good account of the statistical behaviour of photons has its great merit, but we must not shrink from the question as to the theory of the behaviour of single photons. The question of the behaviour of single photons is the more important — as statistical results obtained on the behaviour of photons show that photons do not interact with each other.

Vavilov has demonstrated that a dark spot in an interference pattern is not due to photons extinguishing each other, but that such a spot is not accessible to any individual photon. Thus, each photon (independent of others), after passing through a grating receives a handicap to reach a dark region. This handicap can only come about through an interaction of the photon with the whole of the grating. It is therefore an experimentally established fact that one photon does interact with the whole of a grating and therefore the question cannot be avoided as to the individual behaviour of single photons.

Considering the result of a usual macroscopic experiment, say the interference pattern brought about by a grating, we are only interested in the statistical behaviour of the photons. It is of little interest which particular photon falls on a given part of the pattern. Nevertheless we must inquire as to the properties of the individual photons, which lead to the well-known statistical behaviour of an assembly of photons.

The situation is not unlike that of the kinetic theory of gases. Describing the properties of a volume of gas, it is not of interest what happens to any particular atom. Nevertheless it is of tantamount interest, what the properties of the individual atom are, which properties lead to the known statistical behaviour of the bulk.

In case of the photon it is often asserted that we have to be satisfied with a statistical description and that it is no use to search for the inner mechanism of photons — because it is beyond our power to find it. This assertion seems to us a prejudice which has established itself through several decades and which has hampered a more natural development.

To get the mechanism of a single photon one should attempt to formulate non-linear equations governing the electromagnetic field. These equations should be such that averaged over inner parameters of the photons¹ they should reduce to Maxwell's equations, either exactly or at least in good approximation. The non-linearity of the equations when applied to one photon only would have to account for the quantum effects: i. e. emission and absorption of energy amounts $h\nu$. As seen from previous discussions such a non-linear field must contain action with over-light velocity.

¹ These inner parameters might contain e. g. initial conditions; photons with not very different initial condition might behave quite differently in the long run.

2. *The electron.* The difference between the electron and the photon problems is, that (in low energy processes) electrons unlike photons are not emitted or absorbed. Nevertheless the same type of problem arises in both cases. The Schrödinger equation gives an excellent account of one electron in a stationary state, e. g. of an electron in a stationary orbit of an H-atom. Further the Schrödinger equation describes correctly a free electron and the interference phenomena shown by an electron. If we were to identify an electron with its wave function, as Schrödinger originally proposed (see § 9,1), then we could account for many phenomena — however, just as in the case of the photon such a picture of the electron has its limitation.

Considering an experiment of electron interference, an extended electron wave must be supposed to fall on a lattice which gives rise to the interference. According to the Schrödinger equation the wave is broken up by the lattice into many parts travelling along the beams corresponding to the bright spots of the pattern. Each electron when detected after passing through the lattice, is captured, or gives rise to ions, in the vicinity of one spot only. As the electron appears along one path only it must be supposed that at some stage the extended wave concentrates into one beam only. This concentration may be spontaneous, but it is also possible, that the interaction which leads to the detection of the electron in itself makes the electron to contract into one of the beams only.

Whatever the details of the process, a complete theory ought to describe the contraction. If a suitable non-linear modification of the Schrödinger equation were to describe the actual motion of one electron, including contraction — then this description must be such that averaging over initial parameters of the electron we get a behaviour exactly or at least in good approximation to that expected from Schrödinger's equation. The initial parameters which can be averaged out would play a rôle in the initial condition of the electron — the value of these parameters would determine which of the possible final states the electron achieves eventually in the course of motion.

§ 18. We propose thus, that the electron or photon possesses an extended structure. As long as there are no very large disturbances, this structure moves very nearly in accordance with Schrödinger's equation or Maxwell's equations. The precise motion of the structure is governed by some non-linear equations. The solutions of these non-linear equations deviate in the case of strong interactions and during the processes of contraction from the solutions of the linear equations, but the solutions of the non-linear equations should, averaged over certain parameters α of the initial conditions, reduce, at least in good approximation, to the Schrödinger equation respectively to Maxwell's equations.

Schematically we may say that the motion of a single packet is described by a function $a(\mathbf{r}, t, \alpha)$, obeying some non-linear equation, say

$$S(a) = \frac{\partial a}{\partial t}, \quad (2)$$

although the actual equation need not be necessarily of the first order in time.

So as to get the correct statistical behaviour, we postulate that the average of $|a|^2$, over certain values of α , is equal to ψ . Say

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int |\alpha(\mathbf{r}, t, \alpha)|^2 d\alpha \quad (3)$$

where ψ obeys the ordinary Schrödinger equation. Again (3) is not necessarily the exact connection between a and ψ , the above relation serves only as an illustration of our idea. The integration into α has to be extended over a specified manifold of solutions of (2); these specified solutions might at a time $t = 0$ be all fairly similar but they should separate later.

The parameters α thus introduced are essentially the »hidden parameters«, of which *Neumann* has proved that they do not exist in quantum mechanics. We assert, in spite of *Neumann's* proof, the existence of such parameters. *Neumann* only proved that inside the framework of quantum mechanics there can be no hidden parameters. Thus a system containing hidden parameters cannot behave exactly according to quantum theory. Therefore the conception of the functions $a(\mathbf{r}, t, \alpha)$ containing α as hidden parameter must lead somewhere to results different from those expected by ordinary quantum theory. Such a difference exists indeed between our proposed model and the ordinary quantum theory. The discrepancy can be best demonstrated with help of an example.

§ 19. We consider as an example the case of an electron moving against a potential barrier. According to quantum theory and in essential agreement with experiment, the electron will be reflected or transmitted with certain probabilities.

Suppose we represent one electron by means of a wave packet. The motion of the packet is governed by the Schrödinger equation: slowly diffusing it moves against the barrier. At the barrier it breaks into two parts the one part is reflected back, the other penetrates and proceeds further.

This breaking up is a real breaking up of a packet, since the two parts, united again, can be brought to interference with each other.

On the other hand, if we locate the electron by letting it trigger some measuring arrangement, then we find the whole of the electron in one of the two packets.

Quantum theory asserts that the concentration of the particle into one of the parts of the packet is brought about by measurement. Thus it asserts that the packet remains separated into two halves *until* measurement sets in, and that the measurement extinguishes one half and completes the other half of the packet. According to quantum mechanics as long as no measurement has been made, the halves proceed into opposite directions and, at least in principle, the separated parts could be brought to interference with each other an arbitrary long time after the collision which has lead to the initial separation of the packet

While it is clear that the electron can indeed be located in either of the two beams a long time after the collision, there is no experimental evidence that the two beams could still interfere with each other a long time after the collision.

This assertion of quantum theory according to which the two beams remain coherent indefinitely has not been verified and seems most doubtful on general grounds.

We do not get into contradiction with any real experiment, if we suppose that although the wave packet really breaks up at first when colliding, nevertheless the fractions of the packet do not proceed into opposite directions for an unlimited period. There is no proof to the effect that the fractions remain separated indefinitely and we think it to be much more plausible to assume that the separation comes gradually to an end through a process in which one of the two fractions is being gradually sucked up by the other. It seems plausible that after a sufficient time has elapsed, only one of the fragments survives. We suggest that once the electron has been concentrated into one of the beams, no interference between the two beams can be achieved any more. *Thus it seems reasonable to assume that the wave function describing the breaking up particle, at first describes the real spread of the particle — but gradually the particle itself takes up one definite direction — and then the Schrödinger wave function which remains split, ceases to refer to the behaviour of one particle — and it starts to express the statistical behaviour of many particles.*

Write ψ_1 for a reflected packet and ψ_2 for a transmitted packet. The wave function of one electron, after collision is thus

$$\begin{aligned}\psi &= A\psi_1 + B\psi_2 \\ |A|^2 + |B|^2 &= 1.\end{aligned}$$

Our new assumption is that for a short time after the collision $|\psi|^2$ represents the actual spacial distribution of one electron. Later, the spacial distribution of one electron is given either by $|\psi_1|^2$ or by $|\psi_2|^2$, the probability that the first respectively the second distribution is the correct one is $|A|^2$ and $|B|^2$.

Thus the feature of quantum theory which need not be preserved, as it is not proved experimentally, is that a superposed state $\psi = A\psi_1 + B\psi_2$ (where ψ_1 and ψ_2 are e. g. packets moving away from each other) *permanently* describes the state of one electron. In my opinion this ψ function describes to begin with the state of one particle but gradually it *degenerates* into the description of the statistical superposition of the possible states of the particle.

In terms of the functions $a(\mathbf{r}, t, \alpha)$ this may be expressed in the following way. At the time $t = 0$ there may be two initial states, not very different from each other namely

$$a(\mathbf{r}, 0, \alpha_1) \approx a(\mathbf{r}, 0, \alpha_2) \approx \psi(\mathbf{r}, 0). \quad (4)$$

For large values of t the two initial states separate into essentially different states, such that say

$$\begin{aligned} a(\mathbf{r}, t, \alpha_1) &\approx \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ a(\mathbf{r}, t, \alpha_2) &\approx \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad \text{for } t \text{ large.} \quad (5)$$

Thus the particle is either reflected or it penetrates, which of the two events happens depends on the value of α . While the a -function for a fixed α value describes one of the two processes only, the ψ -function contains both possibilities with their probability amplitudes. The equations (4) and (5) are in agreement with (3) since the cross term $\psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2$ is negligible as ψ_1 and ψ_2 have negligible overlap, once the packets have separated. To get complete agreement we have to assume that the integral $\int d\alpha$ over such vicinities of α_1 and α_2 which are leading to similar final states are proportional to the respective probabilities, thus we have to demand.

$$\int_{\alpha_1} d\alpha \sim |A|^2, \quad \int_{\alpha_2} d\alpha \sim |B|^2. \quad (6)$$

The difference between the old view and ours may thus be summarized as follows:

Suppose a particle to be split on a potential barrier.

We make an observation a long time after the collision. The observation may be either an interference experiment in which the two halves are brought together — or an experiment in which we locate the particle and find out in which of the two beams it is contained. The two experiments mutually exclude each other but we can perform either experiment.

In the old view the first experiment compels the particle to show its extended wave nature — the other compels the particle to appear as a concentrated packet. It is up to the observer which experiment he carries out and, thus the observer decides what is to happen to the wave packet. Since in this way the observer influences essentially what is to happen to the particle, the fate of the particle cannot be foreseen from the inner parameters.

In my view, if we wait long enough, then the two beams cease to be coherent. Thus a long time after the collision we can locate the particle and carrying out many such experiments we find a result in statistical agreement with the quantum theory; but if we try to bring the two beams to interference a sufficiently long time after the collision we would find them incoherent in disagreement with the prediction of quantum theory. Thus after a limited intermediate period, during which intermediate period the packet is really broke up, a definite final state emerges. The kind of process here proposed can be described by a deterministic model — as there is no need to «foresee» in the initial state as to what experiment will be performed eventually on the particle.

So as to complete our proposed picture, we add the following remark. If a packet breaks up in collision with a potential barrier, then we suppose that eventually the parts will unite in form of a definitely reflected or a definitely transmitted packet. It is most likely that given sufficient time such a unification will take place spontaneously, after sufficient separation of the parts had taken place — but it is also likely, that this unification can be catalysed by letting the packet interact with atoms placed to both sides of the barrier. Once namely the packet has given rise to an ion or has excited an atom on one side of the barrier, then it must have contracted into a packet entirely on that side of the barrier, quite regardless of whether or not this ion or excited atom has been observed.

Whether the orthodox view or the here proposed deterministic picture gives a better description of the facts could in principle be decided by experiments investigating whether or not the components of a split electron beam remain indefinitely coherent. This experiment has little prospect of success in this form because the ψ_1 and ψ_2 components a long time after the collision would behave even from the orthodox point of view for all practical purposes as if they were incoherent because of the band of frequencies necessarily contained in the initial wave packet. The difference between the old view and the new is whether a long time after the collision the distribution of electrons is described by

$$|A\psi_1|^2 + |B\psi_2|^2 \quad (6a)$$

or by

$$|A\psi_1 + B\psi_2|^2. \quad (6b)$$

The difficulty in deciding this question lies in the fact that there is no sufficiently marked difference between the two expressions, on which difference a crucial experiment could be based.

Admitting this difficulty of deciding by experiment, we prefer for the time being at any rate the expression (6a) which allows a deterministic description of the phenomena and reject (6b) which implies all the consequences of quantum theory.

§ 20. While the reflection and transmission of an electron on a potential barrier does not seem to be suitable to yield experimental evidence in favour of our considerations or against them there seem to be at least two experimental possibilities to check up the validity of our assertions.

1. In perfect analogy to the breaking up of an electron the breaking up of a photon can be discussed. The question might be asked whether or not two coherent beams of light remain coherent even if they are separated very widely? This question is not connected with the well-known effect of finite coherence length of light. The question is rather this. Taking a Michelson interferometer and increasing the length of the arms without increasing the phase shift of the two beams, does interference cease, if the arms get too long? Similarly the question

can be put whether in the case of the Sagnac experiment, the interference fringes cease if the area around which the two beams have to travel becomes excessive?

It is our opinion that in both cases the interference should cease if separations are made bigger than a certain amount, since interference requires the temporary splitting of single photons and in case of too large an arrangement the separate parts of the photon might show a tendency to unite spontaneously before having finished their path in the interferometer. If the parts of the photon unite by our process of constriction, the beams would be rendered incoherent.

Both the *Michelson* and the *Sagnac* experiments have been carried out with rather large arrangements, thus the upper limit up to which a photon can be separated certainly exceeds many meters.

2. If we assume that the packet corresponding to an electron cannot be separated permanently, then it is also plausible to assume that such a packet cannot become arbitrarily large. Taking the wave function of an electron in an H atom, we know that the radius of the wave packet representing the electron in an orbit corresponding to the quantum number n is

$$r_n = n^2 r_H,$$

where $r_H \sim 10^{-8}$ cm is the Bohr radius. We should thus expect some modification in the H-spectrum at large quantum numbers, provided the electron shows a tendency against expanding to arbitrarily large dimensions. The Balmer spectrum has been observed up to $n \sim 30$ i. e. the electron cloud is known to spread at least up to dimension

$$r_{30} \sim 10^{-5} \text{ cm}.$$

The actual observations of the lines with high quantum numbers are, however, too inaccurate to show whether the lines with high quantum numbers have or have not the frequencies predicted by theory. It would be most useful from this point of view to investigate in detail the highly excited states of hydrogen under extremely low pressure.

3. Our picture of the constricting photon has a somewhat paradoxical consequence, which might lead to an experimentally observable new effect. Suppose an atom A to emit a photon in form of a spherical wave. Suppose further a number of atoms B, C, \dots at various distances from A capable of absorbing the photon. The nearest of these atoms, say B , has a chance of absorbing the photon before it has interacted with atoms further away; but if B does absorb the photon then the photon will not reach the other atoms any more. Thus if there is an atom B near to A , then the presence of this atom should reduce the probability of the photon being absorbed by an atom C at greater distance than B , even, if C and B lie in opposite directions as seen from A . We might express this by saying that the atom B casts a shadow all round A . As we cannot pro-

pose a quantitative theory of the constricting photon, it is useless at this stage to try to discuss details of this process, however, it might be worth while to attempt experiments on photons with the view of clarifying this effect.

§ 21. We give now a schematic example to illustrate the form we think the non-linear modification of the Schrödinger equation may have. It must be emphasized again, that this example is merely meant as illustration. To simplify matters we consider an one-dimensional problem and one-particle problem. Using atomic units, i. e. $\hbar = m = 1$, the ordinary Schrödinger equation can be written

$$-\frac{1}{2}\psi'' + V\psi = i\dot{\psi} \quad (7)$$

where dash⁽¹⁾ represents differentiation into the coordinate x and dot⁽¹⁾ differentiation into time t . The amplitude a obeying the non-linear modification of (7) must be such that it obeys in good approximation (7) as long as stationary states are concerned; but an important difference between a and ψ must be that a should never spread over arbitrarily large areas. The modification of the Schrödinger equation can thus be taken as a weak cohesive force keeping the particle together; the force should increase strongly if the size of the packet increases beyond a certain measure. We introduce such a cohesive force by postulating the following equation for a

$$\left. \begin{aligned} -\frac{1}{2}a'' + (V + \alpha^2 O(x))a &= i\dot{a} \\ O(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} P(x-x') |a(x')|^2 dx' \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

where $P(\xi)$ is an even function monotonically increasing with increasing $|\xi|$.

To fix orders of magnitude, we note that $1/\alpha^2$ has the dimension of a reciprocal length; we may put $\alpha^2 = 1/L$ where L is the distance at which new effects set in. The function $P(\xi)$ should be such that

$$\begin{aligned} P(\xi) &\sim 0 & |\xi| < L \\ P(\xi) &\geq 1 & |\xi| \geq L. \end{aligned}$$

We sketch in the following the mathematical properties of the solutions of (8).

1. *Normalization.* From (8) we see that $O(x)$ is real. Thus denoting with $*$ the complex conjugate we obtain from (8)

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(a'a'' - a^{*'}a) = i\frac{\partial |a|^2}{\partial t}$$

integrating over x from $-\infty$ to $+\infty$ we find, provided $a(x)$ vanishes sufficiently for $|x| \rightarrow \infty$

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |a|^2 dx = 0,$$

thus we may require a to be normalized, i. e.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |a|^2 dx = 1. \quad (9)$$

Equation (9), i. e. the actual value of the normalization, is of importance as (8) is non-linear. Thus a solution a is only fully defined by (8) and (9) together.

2. *Separation of solutions.* We put $a(x, t) = A(x)\beta(t)$, introducing this into (8), we have after division by $a(x, t)$

$$\frac{1}{2} \frac{A''}{A}(x) - V(x) = \alpha^2 |B|^2 \bar{P}(x) + \frac{\ddot{B}}{B}(t) \quad (10)$$

with

$$\bar{P}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x - x') |A(x')|^2 dx'.$$

As the left hand expression is independent of the time, the right hand expression must also be independent of time. Writing down (10) for two x values x_1 and x_2 so that $\bar{P}(x_1) \neq \bar{P}(x_2)$ and subtracting we find

$$\alpha^2 |B|^2 (\bar{P}(x_1) - \bar{P}(x_2)) = \text{independent of } t,$$

thus $|B|^2$ constant and

$$B = e^{i\beta(t)}, \quad \beta(t) \text{ real}. \quad (11)$$

Inserting (11) into (10) we find that $\beta(t)$ must be linear in time. We have thus

$$a(x, t) = A(x)e^{-iEt} \quad (E \text{ real}) \text{ as the}$$

form of any separated solution.

The non-linear amplitude equation is

$$-\frac{1}{2} A_k'' + (V + \alpha^2 \bar{P} - E_k) A_k = 0 \quad (12)$$

where the suffix k refers to the various eigenstates. (12) corresponds to the amplitude equation of Schrödinger

$$-\frac{1}{2} \Phi_k'' + (V - E_k) \Phi_k = 0. \quad (13)$$

3. *Free particle stationary solution.* We consider the solution of (12) for $V(x) = 0$. To see in a qualitative way the kind of solution we get, we specialize for the moment the cohesive force by postulating

$$P(x) = \frac{1}{2} x^2. \quad (14)$$

Introducing (14) into (12) we find for $V = 0$

$$-\frac{1}{2} A_k'' + \frac{\alpha^2}{2} A_k \left\{ x^2 - 2x \int_{-\infty}^{+\infty} x' |A_k(x')|^2 dx' + \int_{-\infty}^{+\infty} x'^2 |A_k(x')|^2 dx \right\} - E_k A_k = 0.$$

By suitable choice of the origin, we can achieve that

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x' |A_k(x')|^2 dx' = 0. \text{ Thus putting}$$

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x'^2 |A_k(x')|^2 dx' = F_k, \quad (15)$$

we see that $A_k(x)$ is the eigenfunction corresponding to the problem of the harmonic oscillator with the fundamental frequency α . Thus we have e. g. for the lowest state of energy

$$E_1 = \frac{1}{2} \alpha + \frac{1}{2} \alpha^2 F_1 \quad (16)$$

and

$$A_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right). \quad (17)$$

Thus with help of (15) and (16)

$$F_1 = \frac{1}{\alpha} \quad \text{and} \quad E_1 = \alpha.$$

We have also more extended excited states with energies equal to $n\alpha$, $n = 2, 3, \dots$

The corresponding solution of the time dependent equation (8) is thus

$$a(x, t) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha x^2 - i\omega t\right)$$

We see therefore that the particle at rest is represented by a Gaussian shaped packet, undergoing no diffusion. The Gaussian type of shape arises from the special choice of $P(\cdot)$. It is plausible, that the tailing off of the stationary solution has in general the following form:

$$A(x) \approx \exp\left(-\alpha \int_{x_0}^x \sqrt{2\bar{P}(x')} dx'\right) \text{ for } x \gg L.$$

4. *Free particle in translation.* If $A(x)$ is a solution of (12), for $V = 0$ then

$$a_v(x, t) = A(x - vt) \exp i\left(vx - \left(E + \frac{1}{2} v^2\right)t\right) \quad (18)$$

is another solution of the time dependent equation. Introducing the above expression into (8) and noting that

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} P(x-x') |a_v(x')|^2 dx' = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x-vt-x') |A(x')|^2 dx' = \bar{P}(x-vt) \end{aligned}$$

where

$$\bar{P}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x-x') |A(x')|^2 dx',$$

we find that (18) indeed satisfies (8) provided $A(x)$ satisfies (12).

We see therefore, that a moving particle can be described by a moving wave train very similar to the known solution of the linear theory, the difference being that the wave train is of finite extension only and is cut off at both ends.

The solution thus obtained is of course only one possible solution. The general solution for the free particle is somewhat difficult to obtain, as it is not the linear combination of particular solutions. We investigate qualitatively a type of more general solution.

We chose as an initial condition a limited wave packet so that

$$a(x, t) = f(x) \text{ for } t = 0,$$

where $f(x) = 0$ for $|x| > \lambda$ where λ has a fixed value so that $\lambda \ll L$. The non-linear perturbation term will thus be very small to begin with; indeed for $t = 0$ we have

$$\bar{P}(x) = \int_{-\lambda}^{\lambda} P(x-x') |f(x')|^2 dx' \leq 2\lambda P(x+\lambda).$$

Thus for $|x| < \lambda$ the correction is proportional to a factor less than $2\alpha^2\lambda P(2\lambda)$, which is small by definition of $P(x)$. For $|x| > \lambda$ the correction term vanishes exactly, because of the factor $f(x)$.

Thus apart from a small correction the packet diffuses in the beginning according to the linear Schrödinger equation. The effect of the correction term is merely to prevent diffusion into the outside region $|x| > L$. The effect of the non-linear term becomes noticeable once the ordinary diffusion has broadened the packet to a width comparable to L .

An analytic solution of the linear Schrödinger equation representing a particle at rest is e. g. given by

$$\Psi(x, t) = \frac{(2\pi)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{b^2 - it}} \exp\left(-\frac{1}{2} x^2 / (b^2 - it)\right)$$

thus

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{b^4 + t^2}} \exp(-x^2 b^2 / (b^4 + t^2)).$$

The width of this packet at the time t is

$$\alpha = \sqrt{b^2 + (t/b)^2}.$$

Provided $b \ll L$, thus, provided the packet was initially much narrower than L , it remains narrow compared with L until

$$t \ll T \quad \text{with} \quad T = Lbm/\hbar.$$

For this period, the ordinary diffusion proceeds only little influenced by the perturbation. For $t \sim T$ the non-linear forces come into play and stop further diffusion.

5. *Particles under influence of a potential.* The motion of the centre of gravity of a packet obeying (8) can be obtained in the usual way as follows.

Multiplying (8) with x , and subtracting the complex conjugate quantity, we find after integration over x

$$\dot{X} \equiv \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} x |a|^2 dx = -i \int_{-\infty}^{+\infty} a^* a' dx. \quad (19)$$

For stationary states the right hand expression is independent of time and

$$\ddot{X} = -i \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} A^* A' dx = 0.$$

For stationary states with real amplitudes, $A^* = A'$, (19) can be carried out, and we find

$$\dot{X} = 0.$$

In the general non-stationary case, we find when differentiating (19) into t

$$\ddot{X} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} (\dot{a}^* a' + a^* \dot{a}') dx;$$

\dot{a}' can be obtained by differentiating (8) into x while \dot{a}^* is obtained from the complex conjugate of (8), thus as a result of a simple calculation we find

$$\ddot{X} = -\frac{\overline{dV}}{dx} - \alpha^2 \frac{\overline{dO}}{dx}$$

where

$$-\frac{\overline{dV}}{dx} = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dV(x)}{dx} |a(x)|^2 dx$$

is the average force on the particle while

$$\frac{d\bar{O}}{dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial O(x)}{\partial x} |a(x)|^2 dx$$

is something like the force of a particle upon itself. The latter »self-force« is, however, exactly zero. Indeed we have from (8)

$$\frac{\partial O(x)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP(x-x')}{dx} |a(x')|^2 dx$$

thus

$$\frac{d\bar{O}(x)}{dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP(x-x')}{dx} |a(x)|^2 |a(x')|^2 dx dx' = 0.$$

The latter integral is zero as $\frac{dP(x)}{dx}$ is necessarily an odd function. Thus the self-force has no effect on the motion of the packet as a whole and the acceleration of the centre of gravity of the packet is given exactly by

$$\ddot{X} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dV(x)}{dx} |a(x)|^2 dx. \quad (20)$$

Thus, just as in the linear theory, the acceleration of the centre of gravity is such as if the force was spread out over the whole of the packet. The difference between our picture and that of the linear theory is that in the old theory under the influence of a potential barrier a packet could break up into two or more fragments and the \ddot{X} referred to the average over all the fragments; in the non-linear theory the packet never exceeds a size much larger than L and the X refers to the motion of this connected packet.

Equation (20) shows that a packet under the influence of a slowly varying force moves in good approximation like a classical particle; indeed, if we neglect the variation of $V(x)$ across the particle we have

$$\ddot{X} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dV}{dx} |a|^2 dx \approx \left(- \frac{dV}{dx} \right)_{x=X}.$$

The analogy to classical theory is much closer in our non-linear theory than in the linear theory, as in the non-linear theory a packet cannot break up or grow to arbitrary large size. Thus, if it behaves classically to begin with it will do so indefinitely.

6. *Collision of a particle with a potential barrier.* Suppose a packet coming from the left collides against a potential barrier which is essentially narrower than the width of the particle. We might suppose e. g. that the particle is given by

$$|a(x, t)|^2 = \frac{\alpha}{\pi} \exp[-\alpha(x-vt)^2] \quad (21)$$

and the potential by

$$V(x) = V_0 \exp(-\beta x^2). \quad (22)$$

If we neglect for the moment the reaction of the potential on the particle then we can introduce (21) and (22) into (2) and we get

$$\begin{aligned} \ddot{X} &\approx \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} V_0 \exp(-\alpha(x-vt)^2 - \beta x^2) dx \\ &= \frac{\gamma^{3/2} V_0 vt \exp(-\gamma v^2 t^2)}{\alpha \beta} \end{aligned}$$

with

$$\gamma = \frac{\alpha \beta}{\alpha + \beta}.$$

Thus in case of a repulsive potential the particle is first slowed down and afterwards accelerated again, in the end it moves with its original velocity. The above approximation is, however, very rough indeed. If we improve the approximation by taking the disturbance of the potential on the wave packet into account, then we get waves reflected on the barrier travelling through the particle and giving rise to interference. Consequently $|a^2|$ will become a complicated function and the total acceleration will oscillate in a complicated manner. It is difficult to foresee what the result of this interaction will be. It seems plausible, although to prove this would need a detailed mathematical investigation, that in the end the particle is either transmitted or reflected, which of the two actually happens depending on detail. It is conceivable that very similar packets might have different fates in the end. It seems that the non-linear model leads to either reflection or transmission in any particular case, how far, the form here proposed leads to a statistically correct distribution of reflection and transmission results, I could not yet ascertain.

7. *Closed stationary states.* A solution of Schrödinger's amplitude equation (13) is a good approximation of the solution of (12) in the region $|x| \ll L$. If the bulk of the solution is inside the interval $|x| \ll L$ then the corresponding energy level \bar{E}_k will be near E_k . This can be seen qualitatively by arguments similar to those employed in discussing a limited wave packet. There exist, however, more than one state \bar{E}_k of the non-linear equation corresponding to one state E_k of the linear equation. These states signify states where the particle is in a »self-excited« state. Schematically the stationary solutions of (12) are obtained as the solution of the linear equation where the potential $V(x)$ is put into the middle of a potential box of width $2L$. The solution of the linear equation sufficiently far from the centre exponentially declines if there is no box. With the box the wave function must be zero at the wall of the box, thus the tail of the actual solution must

contain a small admixture of an increasing exponential, so that the two terms cancel each other at the boundary. The approach to the boundary is possible in two ways as corresponding to two slightly different solutions.

Summarizing, we see, that the non-linear modification of the Schrödinger equation gives only unessential modification of the stationary states of a bound electron. Further it leads to an essentially classical behaviour of a particle in slowly varying fields. Thus the modification leads to little change in the actual results where the old theory is known to be valid. The new feature of the non-linear equation is, that it never leads to a permanent breaking up of a wave-packet.

§ 22. In the last paragraph we have shown by means of an example how a non-linear modification of the Schrödinger equation can be thought of, so that the essential features of wave mechanics remain and the modification affects only results where the predictions of the old wave mechanics do not seem reliable. Our discussion of this non-linear model remained, however, incomplete, in so far as we could not show whether or not it leads to correct statistical results, e. g. we could not show whether the reflection and transmission probabilities of a packet are essentially in agreement with those obtained in the usual way. I hope to investigate the latter problem in the near future.

A further difficulty of our picture is that it seems to be applicable to one-body problems only. Schrödinger actually gave up his interpretation of the smeared-out electron because of the difficulty of extending it to more-particle problems. The latter difficulty might be overcome in our opinion once we make a clear distinction between the wave function ψ and the amplitude a . We have assumed in the example of the previous paragraph that in case of a simple wave packet $\psi \approx a$ until such a time where ψ spreads out over too large a region. The latter assumption might be generalized by dropping completely the direct connection between a and ψ and merely assuming that some kind of time average of a is equal to ψ , thus in the one-body problem we may assume e. g.

$$\frac{1}{2\delta} \int_{-\delta}^{\delta} |a(\mathbf{r}, t + \tau)|^2 d\tau = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (23)$$

with not too large value of δ . Accepting (23) we can generalize and assume in the case of say a two-body problem

$$\frac{1}{2\delta} \int_{-\delta}^{+\delta} |a_1(\mathbf{r}_1, t + \tau)|^2 |a_2(\mathbf{r}_2, t + \tau)|^2 d\tau = |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 \quad (24)$$

where a_1 and a_2 are the amplitudes of two electrons and $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ the Schrödinger wave function describing the state of both electrons together.

Equation (24) shows plausible general features, namely integrating over \mathbf{r}_1 , or \mathbf{r}_2 we get a relation of the type (23). The symmetry of $|\psi|^2$ requires a

certain connection between a_1 and a_2 but this connection is rather weaker than $a_1(r,t) = a_2(r,t)$. An interconnection between the two amplitudes a_1 and a_2 is indeed to be expected as the motion of the one electron is not independent of that of the other.

This very brief sketch given here is meant to show only that it does not in principle seem impossible to generalize Schrödinger's picture of the smeared out electron to many-body problems.

Appendix

We reproduce an extract out of a remarkable lecture delivered by *Max Planck* in 1935 with the title: »Die Physik im Kampf um die Weltanschauung«, although we do not agree with all views expressed in the quotation.

Prüfen wir nun einmal den vorliegenden Sachverhalt. Der theoretischen Physik liegt zugrunde die Annahme der Existenz realer, von den Sinnesempfindungen unabhängiger Vorgänge. Diese Annahme muss unter allen Umständen aufrecht erhalten bleiben; auch die positivistisch eingestellten Physiker bedienen sich tatsächlich ihrer. Denn wenn sie auch an dem Primat der Sinnesempfindungen als der einzigen Grundlage der Physik festhalten, so sind sie doch, um einem unvernünftigen Solipsismus zu entgehen, zu der Annahme genötigt, dass es auch individuelle Sinnestäuschungen, Halluzinationen gibt, und können diese nur ausschliessen durch die Forderung, dass physikalische Beobachtungen jederzeit reproduzierbar sind. Damit wird aber ausgesprochen, was durchaus nicht von vornherein selbstverständlich ist, dass die funktionellen Beziehungen zwischen den Sinnesempfindungen gewisse Bestandteile enthalten, die unabhängig sind von der Persönlichkeit des Beobachters, ebenso wie von der Zeit und dem Ort der Beobachtung, und gerade diese Bestandteile sind das, was wir als das reale an dem physikalischen Vorgang bezeichnen, und was wir in seiner gesetzlichen Bedingtheit zu erfassen suchen.

Zu der Annahme der Existenz realer Vorgänge hat nun aber die klassische Physik, wie wir sahen, stets die weitere Annahme gefügt, dass das Verständnis für die Gesetzmässigkeiten der realen Vorgänge sich vollständig gewinnen lässt auf dem Wege fortschreitender räumlicher und zeitlicher Teilung bis ins unendlich Kleine. Das ist eine Voraussetzung, die bei genauer Betrachtung eine starke Einschränkung enthält. Sie führt z. B. zu dem Schluss, dass die Gesetze eines realen Vorganges sich vollständig verstehen lassen, wenn man ihn trennt von dem Vorgang, mittelst dessen er gemessen wird. Nun liegt es nahe, die folgende Überlegung anzustellen: der Messungsvorgang kann nur dann von dem realen Vorgang Kunde geben, wenn er mit ihm irgendwie kausal zusammenhängt und wenn er mit ihm kausal zusammenhängt, wird er ihn im allgemeinen auch mehr oder weniger beeinflussen und ihn in gewisser Weise stören, wodurch das Messungsergebnis verfälscht wird. Diese Störung und der durch sie bedingte Fehler wird

um so bedeutender sein, je enger und feiner der Kausalnexus ist, der das reale Objekt mit dem Messungsinstrument verknüpft, die Störung wird sich herabmindern lassen, wenn man den Kausalnexus lockert, oder wie wir sagen können, wenn man die Kausaldistanz zwischen Objekt und Messungsinstrument vergrössert. Ganz vermeiden lässt sich die Störung nie; denn wenn man die Kausaldistanz unendlich gross nimmt, d. h. wenn man Objekt und Messungsinstrument vollständig voneinander trennt, so erfährt man überhaupt nichts von dem realen Vorgang.

Da nun gerade die Messungen an einzelnen Atomen und Elektronen äusserst feine und empfindliche Methoden, also eine enge kausale Distanz erfordern, so versteht man, dass die genaue Bestimmung der Lage eines Elektrons mit einem verhältnismässig starken Eingriff in seinen Bewegungszustand verbunden ist, und ebenso umgekehrt, dass die genaue Messung der Geschwindigkeit eines Elektrons eine verhältnismässig lange Zeit erfordert. Im ersten Fall wird die Geschwindigkeit des Elektrons gestört, im zweiten Fall verwischt sich die Lage des Elektrons im Raume. Das gibt eine Kausalerklärung für die oben besprochene Ungenauigkeitsrelation.

So einleuchtend diese Überlegung erscheint, kann sie doch noch nicht den eigentlichen Kern unseres Problems treffen. Denn der Umstand, dass der Ablauf eines physikalischen Vorganges durch das Messungsinstrument gestört wird, ist auch in der klassischen Physik wohlbekannt, und es wäre von vornherein gar nicht einzusehen, warum es nicht bei fortschreitender Verfeinerung der Messungsmethoden einmal gelingen sollte, auch bei Elektronen den Betrag der Störung im voraus zu berechnen. Wir müssen also, um dem Versagen der klassischen Physik im Bereich des Mikrokosmos auf den Grund zu kommen, noch etwas tiefer schürfen.

Einen wichtigen Schritt vorwärts in dieser Frage brachte die Aufstellung der Quantenmechanik oder Wellenmechanik, aus deren Gleichungen sich nach genauen Vorschriften die beobachtbaren atomaren Vorgänge in voller Übereinstimmung mit der Erfahrung berechnen lassen. Allerdings liefert die Quantenmechanik nicht wie die klassische Mechanik die Lage eines einzelnen Elektrons zu einer bestimmten Zeit, sondern sie liefert nur die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich ein Elektron zu einer bestimmten Zeit in irgendeiner beliebig angenommenen Lage befindet, oder, wie man auch sagen kann, sie liefert für eine grosse Schar von Elektronen diejenige Anzahl derselben, welche zu einer bestimmten Zeit sich in irgendeiner Lage befinden.

Das ist ein Gesetz von lediglich statistischem Charakter. Seine ausgezeichnete Bestätigung durch alle vorliegenden Messungen auf der einen Seite, und die Tatsache der Ungenauigkeitsrelation auf der anderen Seite haben eine Reihe von Physikern veranlasst, die statistische Gesetzmässigkeit als die einzige und endgültige Grundlage für alle gesetzlichen Beziehungen, zunächst einmal auf

dem Gebiet der Atomphysik anzusehen und die Frage nach der Kausalität der einzelnen Ereignisse für physikalisch sinnlos zu erklären.

Hier stossen wir nun auf einen Punkt, dessen nähere Erörterung von besonderer Wichtigkeit ist, da sie tief in die grundsätzliche Frage nach der Aufgabe und nach den Leistungen der Physik hineinführt. Wenn man als Aufgabe der physikalischen Wissenschaft die Aufdeckung der gesetzmässigen Beziehungen zwischen den realen Vorgängen in der Natur betrachtet, so gehört die Kausalität mit zum Wesen der Physik und ihre grundsätzliche Ausschaltung muss zum mindestens als stark bedenklich empfunden werden.

Vor allem ist zu bemerken, dass die Gültigkeit statistischer Gesetzmässigkeiten mit dem Walten einer strengen Kausalität sehr wohl verträglich ist. Schon die klassische Physik enthält zahlreiche Beispiele dafür. Wenn z. B. der Druck eines Gases auf die umschliessende Gefässwand durch den unregelmässigen Anprall der zahlreichen nach allen Richtungen durcheinanderfliegenden Gasmoleküle seine Erklärung findet, so steht damit nicht in Widerspruch, dass der Stoss eines einzelnen Moleküls gegen die Wand oder gegen ein anderes Molekül nach einem ganz bestimmten Gesetz erfolgt und daher kausal vollkommen determiniert ist. Nun mag man einwenden, dass strenge Kausalität bei einem Vorgang erst dann als unwiderleglich bewiesen erachtet werden kann, wenn man in der Lage ist, den Verlauf des Vorganges genau vorausszusagen, dass aber niemand die Bewegung eines einzelnen stossenden Moleküls zu kontrollieren vermag. Demgegenüber ist zu erwidern, dass ein wirkliches genaues Voraussagen eines Vorganges in der Natur überhaupt in keinem einzigen Falle möglich ist, und dass daher von einer unmittelbaren exakten experimentellen Prüfung der Gültigkeit des Kausalgesetzes niemals die Rede sein kann. Bei jeder noch so genauen Messung zeigen sich unvermeidliche Beobachtungsfehler. Deswegen wird aber doch sowohl das Messungsergebnis als auch jeder einzelne Beobachtungsfehler auf besondere kausale Bedingungen zurückgeführt. Wenn wir am Meeresufer dem Spiel der schäumenden Brandung zuschauen, so hindert uns nichts an der Überzeugung, dass jedes einzelne Wasserbläschen bei seiner Bewegung streng kausalen Gesetzen folgt, obwohl wir nicht daran denken können, sein Entstehen und Vergehen im einzelnen zu verfolgen, geschweige denn vorauszuberechnen.

Aber jetzt wird hier die Ungenauigkeitsrelation ins Feld geführt. Solange die klassische Physik in Geltung war, konnte man hoffen, dass die unvermeidlichen Beobachtungsfehler durch gehörige Steigerung der Messgenauigkeit unter jede Grenze herabzumindern seien. Diese Hoffnung ist seit der Entdeckung des elementaren Wirkungsquantums zunichte geworden. Denn das Wirkungsquantum setzt eine bestimmte objektive Grenze für die erreichbare Genauigkeit fest, und innerhalb dieser Grenze gibt es keine Kausalität mehr, sondern nur noch Unsicherheit und Zufall.

Die Antwort auf diesen Einwand haben wir schon vorbereitet. Der Grund für die Ungenauigkeit der Messungen in der Atomphysik braucht nicht in einem Versagen der Kausalität zu liegen, sondern sie kann ebensowohl auf einem Fehler der Begriffsbildung und der daran anknüpfenden Fragestellung beruhen.

Gerade die Wechselwirkungen zwischen dem Messungsvorgang und dem realen Vorgang sind es ja, welche uns die Ungenauigkeitsbeziehung wenigstens bis zu einem gewissen Grade kausal verständlich machten. Danach können wir die Bewegung eines Elektrons ebensowenig im einzelnen verfolgen, wie wir etwa ein farbiges Bild sehen können, dessen Dimensionen noch kleiner sind als die Wellenlänge seiner Farbe.

Freilich: den Gedanken, dass es mit der Zeit doch einmal gelingen werde, die Unsicherheit physikalischer Messungen durch Verfeinerung der Messungsinstrumente in unbeschränktem Masse herabzumindern, müssen wir als sinnlos ablehnen. Aber gerade die Existenz einer derartigen objektiven Schranke, wie sie durch das elementare Wirkungsquantum dargestellt wird, muss als ein Zeichen für das Walten einer gewissen neuartigen Gesetzlichkeit bewertet werden, die doch ihrerseits sicherlich nicht auf Statistik zurückgeführt werden kann. Und ebenso wie das Wirkungsquantum stellt auch jede andere elementare Konstante, wie z. B. die Ladung oder die Masse eines Elektrons, eine absolut gegebene reale Grösse vor, und es erscheint mir völlig abwegig, wenn man diesen universellen Konstanten, wie es die Verneiner jeglicher Kausalität eigentlich konsequenterweise tun müssten, eine gewisse prinzipielle Ungenauigkeit beilegen wollte.

Dass den Messungen in der Atomphysik eine prinzipielle Genauigkeitsgrenze gezogen ist, wird auch durch die Überlegung verständlich, dass die Messungsinstrumente ja selber aus Atomen bestehen und dass die Genauigkeit jedes Messinstrumentes ihre Grenze findet in der Empfindlichkeit, mit der es anspricht. Mit einer Brückenwaage kann man nicht auf Milligramme genau messen.

Wenn man nun aber nur Brückenwaagen zur Verfügung hat und wenn jede Aussicht fehlt, sich feinere Waagen zu verschaffen? Ist es dann nicht ratsamer, auf den Versuch genauer Wägungen grundsätzlich zu verzichten und die Frage nach den einzelnen Milligrammen für sinnlos zu erklären, als einer Aufgabe nachzuspüren, die durch direkte Messungen gar nicht gelöst werden kann? Wer so spricht, der unterschätzt die Bedeutung der Theorie. Denn die Theorie führt uns in gewisser von vornherein gar nicht absehbarer Weise über die direkten Messungen hinaus, vermitteltst der sogenannten Gedankenexperimente, die uns weitgehend unabhängig machen von den Mängeln der wirklichen Instrumente.

Nichts ist verkehrter als die Behauptung, ein Gedankenexperiment besitze nur insofern Bedeutung, als es jederzeit durch Messung verwirklicht werden kann. Wenn das richtig wäre, so würde es z. B. keinen exakten geometrischen Beweis geben. Denn jeder Strich, den man auf dem Papier ziehen

kann, ist in Wirklichkeit keine Linie, sondern ein mehr oder weniger schmaler Streifen, und jeder gezeichnete Punkt ist in Wirklichkeit ein kleinerer oder grösserer Fleck. Trotzdem zweifeln wir nicht an der strengen Beweiskraft geometrischer Konstruktionen.

Mit dem Gedankenexperiment erhebt sich der Geist des Forschers über die Welt der wirklichen Messwerkzeuge hinaus, sie verhelfen ihm zur Bildung von Hypothesen und zur Formulierung von Fragen, deren Prüfung durch wirkliche Experimente ihm den Einblick in neue gesetzliche Zusammenhänge eröffnet, auch in solche Zusammenhänge, welche einer direkten Messung unzugänglich sind. Ein Gedankenexperiment ist an keine Genauigkeitsgrenze gebunden, denn Gedanken sind feiner als Atome und Elektronen, auch fällt dabei die Gefahr einer kausalen Beeinflussung des zu messenden Vorganges durch das Messungsinstrument fort. Die einzige Bedingung, von der die erfolgreiche Durchführung eines Gedankenexperimentes abhängt, ist die Voraussetzung der Gültigkeit widerspruchsfreier gesetzlicher Beziehungen zwischen den betrachteten Vorgängen. Denn was man als nicht vorhanden voraussetzt, darf man auch nicht zu finden hoffen.

Gewiss ist ein Gedankenexperiment eine Abstraktion. Aber diese Abstraktion ist dem Physiker, und zwar sowohl dem Experimentator wie dem Theoretiker, bei seiner Forschungsarbeit ebenso unentbehrlich wie diejenige, dass es eine reale Aussenwelt gibt. Denn ebenso wie wir bei jedem Vorgang, den wir in der Natur beobachten, etwas voraussetzen müssen, was unabhängig von uns verläuft, müssen wir, auf der andern Seite danach trachten, uns von den Mängeln unserer Sinne und unserer Messungsmethoden möglichst zu befreien, und von einer höheren Warte aus die Einzelheiten des Vorganges zu durchschauen. Diese beiden Abstraktionen sind gewissermassen einander entgegengesetzt. Der realen Aussenwelt als Objekt steht der sie betrachtende ideale Geist als Subjekt gegenüber. Beide lassen sich nicht logisch deduzieren, und es ist daher auch nicht möglich, diejenigen, die sie ablehnen, ad absurdum zu führen. Aber dass sie bei der Entwicklung der physikalischen Wissenschaft beide eine entscheidende Rolle spielen, ist nun einmal eine Tatsache, von der jedes Blatt der Geschichte Zeugnis ablegt. Gerade die grossen Geister und Bahnbrecher der Physik, die *Kepler*, *Newton*, *Leibniz*, *Faraday*, wurden getrieben von ihrem Glauben einerseits an die Realität der Aussenwelt, anderseits an das Walten einer höheren Vernunft in oder über ihr.

Man sollte nie vergessen, dass alle schöpferischen physikalischen Ideen ihren Ursprung an dieser zweifachen Quelle haben, zunächst allerdings meist in mehr oder weniger provisorischer, durch die Eigenart der Phantasie des einzelnen Forschers bedingter Gestaltung, dann mit der Zeit in mehr bestimmte und selbständigere Formen gefasst. Gewiss hat es in der Physik stets auch eine Anzahl von trügerischen Ideengängen gegeben, auf die vielfach unnütze Arbeit verwendet wurde. Aber auf der andern Seite hat sich doch auch manches Problem

das zunächst von scharfen Kritiken als sinnlos abgelehnt wurde, als höchst bedeutungsvoll erwiesen. Noch vor 50 Jahren galt bei allen positivistisch denkenden Physikern die Frage der Bestimmung des Gewichts eines einzelnen Atoms als physikalisch sinnlos, als ein Scheinproblem, weil es einer wissenschaftlichen Untersuchung unzugänglich sei. Heute lässt sich das Gewicht eines Atoms bis auf den zehntausendsten Teil seines Betrages angeben, obwohl unsere feinsten Waagen zur direkten Messung ebenso untauglich sind, wie eine Brückenwaage zur Messung von Milligrammen. Daher muss man sich wohl hüten, ein Problem, für dessen Bewältigung vorerst kein deutlicher Weg zu erblicken ist von vornherein für ein Scheinproblem zu erklären. Es gibt eben nun einmal kein Kriterium, um a priori zu entscheiden, ob ein vorliegendes Problem physikalisch sinnvoll ist oder nicht. Das ist ein Punkt, der von den Positivisten vielfach übersehen wird. Die einzige Möglichkeit, um zu einer richtigen Bewertung des Problems zu gelangen, liegt in der Prüfung der Folgerungen, zu denen es führt. Daher werden wir auch angesichts der fundamentalen Bedeutung, welche die Voraussetzung einer streng waltenden Gesetzmäßigkeit für die physikalische Wissenschaft besitzt, die Frage nach ihrer Anwendbarkeit in der Atomphysik nicht vorschnell für sinnlos erklären dürfen, sondern wir werden zunächst einmal alles versuchen müssen, dem Problem der Gesetzmäßigkeit auf diesem Gebiet auf die Spur zu kommen.

REFERENCES

- 1a. Д. И. Блохинцев, Основы Квантовой Механики, Москва, 1949, § 129. (Also Hungarian Edition.)
- 1b. Д. И. Блохинцев, Доклады Академии Наук, **82**, 553, 1952. (See there also for references of earlier work by the same author.)
2. Я. И. Френкель, Успехи Физических Наук, **41**, 110, 1951.
3. В. А. Фок, Успехи Физических Наук, **45**, 4, 1951.
4. A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777, 1935.
5. D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 166, 1952.
6. M. Planck, Ann. d. Phys. **37**, 261, 1940; **40**, 481, 1941.
7. M. Planck, Die Physik im Kampf um die Weltanschauung, J. A. Barth, Leipzig 1937.
8. P. Selényi, Ann. d. Phys. **35**, 444, 1911.
9. P. Selényi, Z. f. Phys. **108**, 401, 1938.
10. E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **61**, 69, 1920.
11. С. И. Вавлов, Микроструктура Света, Москва, 1950.
12. P. Dirac, Principles of Quantummechanics, 3rd edition, Oxford, 1947.

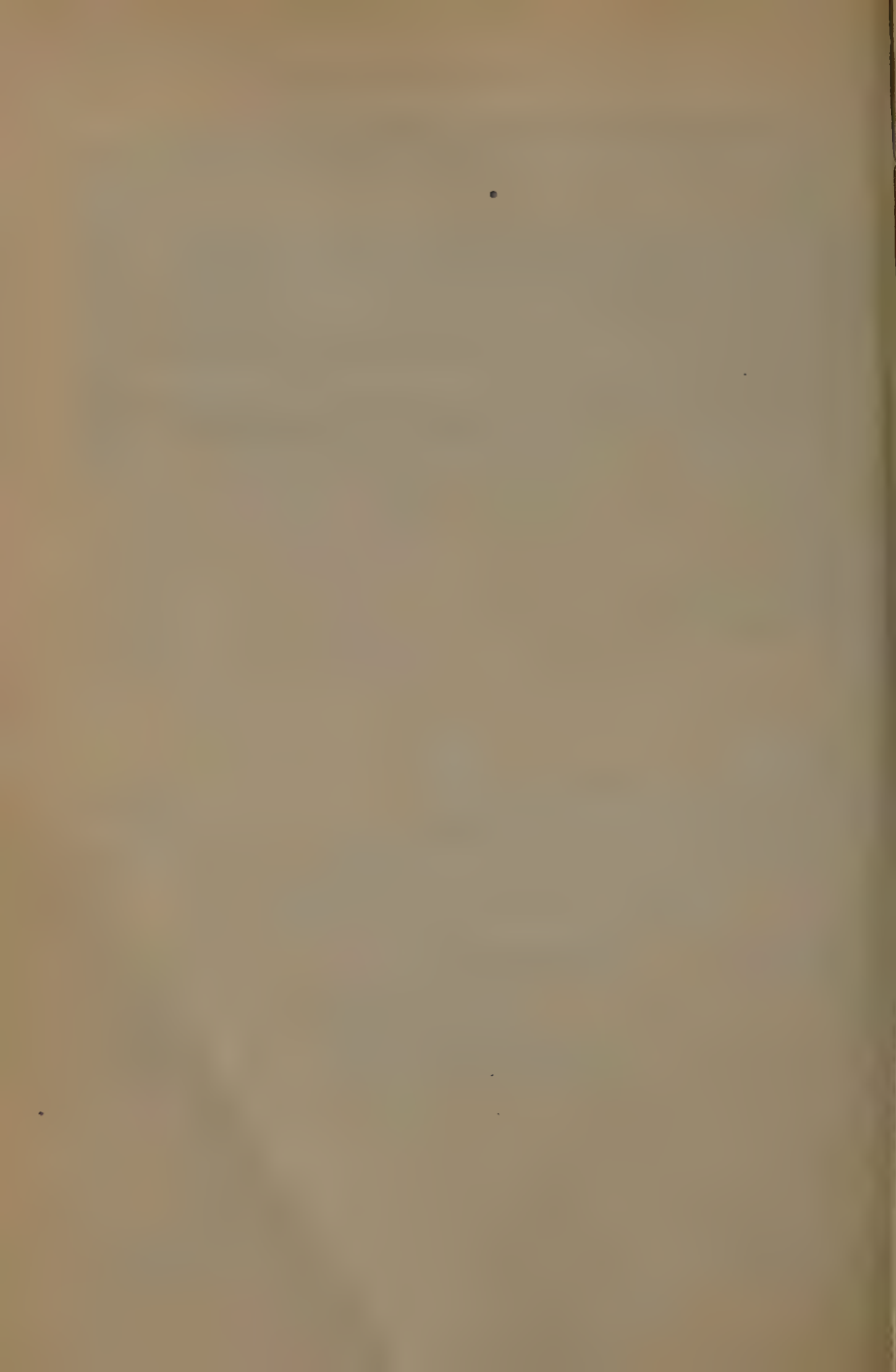
ФИЗИЧЕСКИЕ ОТНОШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ ВОЛНЫ ЧАСТИЦЫ

Л. Яноши

Р е з ю м е

В статье анализируются основные понятия квантовой теории. Подробно исследуется вопрос, разве результаты ортодоксальной квантовой теории безусловно следуют из экспериментальных данных. Из этого анализа автор приходит к заключению, что можно оставить без внимания несколько спекулятивных результатов квантовой теории и представляется возможность, хотябы принципиально найти для квантовых явлений модель, стоящая бы намного ближе к классической, чем это обычно считается. Такая модель смогла бы сделать излишними неприемлимые идеалистические конклюдзии теории, без того, чтобы попала бы в противоречие с результатами теории, основывающихся непосредственно на опыте.

Модель в ярко выраженной форме использует предположение, что имеется действие распространяющееся со скоростью — большей скорости распространения света. В статье подчеркивается, что последовательный анализ экспериментальных фактов безусловно приводит к таким предположениям.



LETTERS TO THE EDITOR

UNTERSUCHUNGEN ÜBER DIE BLAUEN BANDEN DES SrO

(Eingegangen : 9. II. 1952.)

Das blaue Bandensystem des SrO-Moleküls wurde im Lichtbogen (zwischen mit Strontiumsalz getränkten Kohleelektroden) mit einem 6,5 m-Konkavgitter aufgenommen, und die Rotationsanalyse der 0—1, 0—3, 1—1 und 1—4 Banden durchgeführt. Die Banden, die sich gegenseitig stark überlagern, enthalten je einen P-, R- und Q-Zweig und können einem Elektronenübergange ${}^1\Pi-{}^1\Sigma$ zugeordnet werden. Für die Rotationskonstanten der untersuchten Schwingungsniveaus ergaben sich die folgenden Werte (in cm^{-1}) :

$$B'_0 = 0,2928; D'_0 = 0,47 \cdot 10^{-6} \quad B''_1 = 0,3346; D''_1 = 0,33 \cdot 10^{-6}$$

$$B'_1 = 0,2916; D'_1 = 0,54 \cdot 10^{-6} \quad B''_3 = 0,3306; D''_3 = 0,48 \cdot 10^{-6}$$

$$B''_4 = 0,3288; D''_4 = 0,57 \cdot 10^{-6}.$$

Das infrarote Bandensystem des SrO entspricht nach *Almkvist* und *Lagerqvist* [1] einem ${}^1\Sigma-{}^1\Sigma$ Elektronenübergang ; hier sind die Rotationskonstanten der bisher bekannten Schwingungsniveaus $v'' = 0$ und 1 des unteren Elektronenzustandes : $B'_0 = 0,3368$, $D'_0 = 0,35 \cdot 10^{-6}$, $B'_1 = 0,3347$, $D'_1 = 0,38 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$. Auf Grund der recht guten Übereinstimmung dieser Werte von B'_1 , D'_1 , sowie von B'_e und α'_e ($B'_e = 0,3378$, $\alpha'_e = 0,0020$) mit den entsprechenden, aus dem blauen System erhaltenen Werten (hier ist $B'_e = 0,3375$, $\alpha'_e = 0,00195$) hat man es als bewiesen anzusehen, dass der untere Elektronenzustand des blauen Bandensystems mit dem unteren Zustand des infraroten Systems gemeinsam ist.

Die Rotationsanalyse ergibt für die Wellenzahlen der Null-linien der untersuchten vier Banden des blauen Systems :

$$\nu_0(0,1) = 23988,94, \nu_0(0,3) = 22721,31, \nu_0(1,1) = 24502,36,$$

$$\nu_0(1,4) = 22612,98 \text{ cm}^{-1}.$$

Die unter Verwendung dieser Daten (und der Konstanten B'_1 , B'_1) berechneten

Wellenzahlen der Bandenkanten sind in den mittleren Zeilen der nachstehenden Tabelle angegeben und mit den Ergebnissen der Schwingungsanalysen von Mahanti [2], bzw. von Mecke und Guillery [3] (in den ersten bzw. dritten Zeilen

$\begin{matrix} v'' \\ \backslash \\ v' \end{matrix}$		1
1	23990,32	24502,41
	23991,29	24504,61
	23993,9	24506,9
3	22723,58	
	22723,90	
	22729,1	
4		22613,50
		22615,58
		22621,4

der Tabelle) verglichen. Beachtet man, dass die letzteren Werte auf Grund von Messungen mit Prismenspektrographen relativ kleiner Dispersion gewonnen wurden, so kann die Übereinstimmung als gut bezeichnet werden.

Eine ausführliche Mitteilung erfolgt demnächst.

I. KOVÁCS und A. BUDÓ

Spektroskopische Abteilung
des Physikalischen Zentralforschungsinstitutes
der Ung. Akademie der Wissenschaften.

LITERATUR

1. G. Almkvist und A. Lagerqvist, Ark. f. Fys. **1**, 477, 1949; **2**, 233, 1950.
2. P. C. Mahanti, Phys. Rev. **42**, 609, 1932.
3. R. Mecke und M. Guillery, Phys. Zs. **28**, 514, 1928.

INDEX

Вступлениe — Introduction — Einleitung	1
T. A. Hoffmann and A. Kónya : Some investigations in the field of the theory of solids. I. Linear chain of similar atoms. — Т. А. Гофман — А. Коня: Исследования по теории твердых тел. I. Линейная цепь однородных атомов	5
L. Jánossy : Search for periodicities. — Л. Яноши: Отыскание периодичностей	36
A. Dallos : Pulse spectrograph. — А. Даллош: Импульсный спектрограф	56
P. Gombás und R. Gáspár : Zur Lösung der Thomas—Fermi—Diracschen Gleichung. — П. Гомбаш и Р. Гашпар: К решению уравнения Томаса—Ферми—Дирака	66
P. Selényi : Über die Möglichkeit einer Abänderung und Weiterentwicklung des Eötvös'schen Versuches der gedrehten Waage. — П. Шеленьи: Об одной возможности модификации и усовершенствования эксперимента вращающихся весов Этвеша	75
A. Budó und I. Kovács : Über die Störungen in Bandenspektren. — А. Будо и И. Ковач: Возмущения в полосатых спектрах	84
I. Kovács : Über die Berechnung der Rotationskonstanten von zweiatomigen Molekültermen auf Grund von Störungsdaten II. — И. Ковач: Обоженный способ определения постоянных в молекулярных термах дающих возмущения, на основании данных возмущения	97
G. Marx : Some notes on the quantisation of real fields	104
P. Román : A new statistical theory of atomic nuclei. — П. Роман: Новая статистическая теория атомного ядра	107
E. Nagy : Luminescence phenomena in willemite phosphors. — Э. Надь: Явления люминесценции и их толкование	115
E. Nagy and Gy. Gergely : Spectra in phosphorescence. — Э. Надь и Г. Гергель: Спектры при фосфоресценции	127
Z. Bodó : Some optical properties of luminescent powders. — З. Бодо: Оптические свойства люминесцентных порошков	135
Th. Neugebauer : Über einen Zusammenhang zwischen Gravitation und Magnetismus. — Т. Нейребайер: Новое соотношение между тяготением и магнетизмом	151
Th. Neugebauer : Zu dem Problem der Nullpunktsunruhe. — Т. Нейребайер: Проблема движения нулевой точки	167
T. A. Hoffmann : Some investigations in the field of the theory of solids. II. Linear chain of different atoms. Binary systems. — Т. А. Гофманн: Исследования по теории твердых тел. II. Линейная цепь различных атомов	175

Gy. Gergely: Notes on the rise and decay of willemite luminescence	197
Z. Gyulai und S. Bieleck †: Übergangsschicht zwischen wachsenden Kristallen und ihrer Lösung. — З. Дьюлай и Ш. Билек: Переходный граничный слой между растущим кристаллом и его раствором	199
G. Marx: Drehimpuls in der Quantentheorie der Wellenfelder. — Г. Маркс: Импульсвращения в квантовой теории полей	209
I. K. Csada: On the magnetic effects of turbulence in ionized gases. — И. К. Чада: Магнитный эффект турбулентного состояния в ионизированных газах	235
Á. Bardócz: Investigations concerning light sources for spectrum analysis. I. Interrupted arc source for spectrum analysis. — А. Бардоц: Прерывистый дугообразующий аппарат для спектрального анализа	247
I. P. Valkó and Gy. Gergely: A new method for investigating relaxation processes. — И. П. Валко и Д. Гергель: Новый метод исследования релаксационных явлений ..	261
R. Pauncz: Korrektur in der Fermischen kinetischen Energieformel. — Р. Паунц: Коррекция формулы кинетической энергии Ферми	277
P. Gombás: Über eine Erweiterung der statistischen Formulierung des Besetzungsverbotens vollbesetzter Elektronenzustände in Atomen. — П. Гомбаш: Новая статистическая формулировка принципа заполнения в случае атомов	283
P. Gombás: Über ein statistisches Atommodell in welchem die Elektronen nach der Nebenquantenzahl gruppiert sind. — П. Гомбаш: О статистической модели атома, в которой электроны сгруппированы к вспомогательному квантовому числу	291
P. Gombás: Zur Theorie der Edelmetalle und der Alkalimetalle. — П. Гомбаш: О теории благородных металлов и щелочных металлов	301
P. Gombás und R. Gáspár: Über eine theoretische Begründung der Slaterschen halbempirischen Atom Eigenfunktionen. — П. Гомбаш и Р. Гашпар: О теоретическом обосновании полуэмпирических атомных собственных функций Слатера	311
G. Freud: Über die Mohrensteinsche Berechnung des H ₂ Moleküls	321
P. Gombás: Die statistische Theorie des Atomkerns. I. Teil. — П. Гомбаш: Статистическая теория атомных ядер	331
L. Jánossy: On the physical interpretation of the Lorentz-transformation. — Л. Яноши: О физическом истолковании трансформации Лоренца	341
L. Jánossy: The physical aspects of the wave-particle problem. — Л. Яноши: Физические отношения проблемы волны частицы	411
I. Kovács und A. Budó: Untersuchungen über die blauen Banden des SrO	421